

Copyright ©

Es gilt deutsches Urheberrecht.

Das Werk bzw. der Inhalt darf zum eigenen Gebrauch kostenfrei heruntergeladen, konsumiert, gespeichert oder ausgedruckt, aber nicht im Internet bereitgestellt oder an Außenstehende weitergegeben werden ohne die schriftliche Einwilligung des Urheberrechtsinhabers. Es ist nicht gestattet, Kopien oder gedruckte Fassungen der freien Onlineversion zu veräußern.

German copyright law applies.

Copyright and Moral Rights for this thesis are retained by the author and/or other copyright owners. The work or content may be downloaded, consumed, stored or printed for your own use but it may not be distributed via the internet or passed on to external parties without the formal permission of the copyright holders. It is prohibited to take money for copies or printed versions of the free online version.

15. Juli 1996

Z 945-1

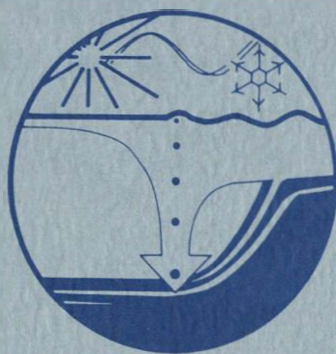
666

BERICHTE

aus dem

SONDERFORSCHUNGSBEREICH 313

VERÄNDERUNGEN DER UMWELT - DER NÖRDLICHE NORDATLANTIK



Nr. 65

SPECTRUM und ENVELOPE
Computerprogramme zur Spektralanalyse nicht
äquidistanter paläoklimatischer Zeitreihen

MICHAEL SCHULZ

CHRISTIAN-ALBRECHTS-UNIVERSITÄT ZU KIEL · 1996

Nr. 65

SPECTRUM und ENVELOPE
Computerprogramme zur Spektralanalyse nicht
äquidistanter paläoklimatischer Zeitreihen



Michael Schulz

Kurzfassung

Ein wesentliches Hilfsmittel zur Entschlüsselung von periodischen Veränderungen des Klimas bildet die Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen. Aus der Darstellung der Grundlagen der uni- und bivariaten Spektralanalyse wird deutlich, daß es sich hierbei um kein vollkommen objektives, statistisches Schätzverfahren handelt. Vielmehr lassen sich in Abhängigkeit von frei wählbaren Parametern sehr unterschiedliche Resultate erzielen. Daneben existieren verschiedene Fehlerquellen, die anhand künstlich generierter Datensätze untersucht werden und bei der Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen berücksichtigt werden müssen. Als besonders nachteilig stellt sich die Interpolation von nicht äquidistanten Zeitreihen heraus. Die in der Regel verwendeten Interpolationsverfahren führen meistens zu einem Varianzverlust, der besonders die höherfrequenten Anteile eines Spektrums betrifft und deutliche Fehlinterpretationen zur Folge haben kann.

Durch einen alternativen Ansatz der Fourier-Transformation ist es möglich, nicht äquidistante Zeitreihen direkt zu analysieren. Basierend auf diesem Ansatz wurde ein Computerprogramm (SPECTRUM) für MS-DOS-Computer entwickelt, das speziell an die Anforderungen paläoklimatischer Zeitreihenanalysen angepaßt wurde.

Weiterhin werden Methoden beschrieben, die geeignet sind, das Vorhandensein periodischer Signalkomponenten in einer Zeitreihe (z.B. Milanković-Perioden) zu überprüfen. Phasenbeziehungen zwischen verschiedenen Klimaindikatoren bei diesen Perioden sollten nur dann zur Interpretation herangezogen werden, wenn entsprechende Signalkomponenten in beiden Zeitreihen vorhanden sind und gleichzeitig eine signifikante Kohärenz besteht. Letzteres ist allerdings keine hinreichende Bedingung, um eine lineare Beziehung zwischen zwei Klimaindikatoren zu postulieren. Geschätzte Phasenwinkel können mit systematischen Fehlern behaftet sein, die aufgrund der Analyse stochastischer Fehlerkomponenten leicht unterschätzt werden können. Darüberhinaus muß berücksichtigt werden, daß geschätzte Phasenwinkel aufgrund der Begrenzung auf das Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ mehrdeutig sind.

Abschließend wird das Computerprogramm ENVELOPE vorgestellt, daß die Schätzung der zeitlichen Amplitudenveränderung von Signalkomponenten (Hüllkurven, evolutionäres Spektrum) von nicht äquidistanten Zeitreihen erlaubt.

Abstract

Spectral analysis of paleoclimatic time series is an important tool for unraveling periodic climatic variability. Based on the outline of the principles of uni- and bivariate spectral analysis, it becomes evident, that one is not dealing with an objective statistical estimation procedure. Different results can be obtained depending on the choice of free analytical parameters. Additional sources of errors exist, that are investigated using generated time series and must be considered when analysing paleoclimatic time series. It is demonstrated that the interpolation of unevenly spaced time series is very disadvantageous. The commonly applied interpolation methods lead to a significant loss of variance, being particularly pronounced at the high frequency end of a spectrum, and may result in serious misinterpretations of the data.

An alternative Fourier-Transform allows the direct analysis of unevenly spaced time series. Based on this approach a computer program (SPECTRUM) for MS-DOS computers was developed. The program is especially designed for the purpose of paleoclimatic time series analysis.

In addition, methods for detecting periodic signals (e.g. Milanković periods) in a time series are described. Phase relationships between different climate proxies at such frequencies should only be interpreted if the signal is present in both time series and if a significant coherency exists. The latter is, however, not a sufficient condition for postulating a linear relationship between two climate proxies. Estimated phase-angles may be affected by systematic errors, that are often underestimated since only random errors are considered. Furthermore phase-angles are ambiguous due to their limitation on the interval $[-180^\circ, 180^\circ]$.

Finally, the computer program ENVELOPE is presented, that allows the estimation of time varying amplitudes of signal components (envelope, evolutionary spectrum) of unevenly spaced time series.

Verwendete Symbole und Abkürzungen

Symbole (Es sind nicht sämtliche Indizierungsvarianten aufgeführt.)

a, a_0, a_1, a_2	reelle Parameter
A_0, A_s	Amplitude einer Sinusschwingung
$A(t)$	Hüllkurvenfunktion
$A_d(k)$	Hüllkurvenamplitude des k -ten Segmentes
$A(\omega_k)$	Parameter bei der LS-Fourier-Transformation
b	reeller Parameter
B_s	spektrale Bandbreite
b_w	3 dB-Bandbreite
B_w	6 dB-Bandbreite
$B(\omega_k)$	Parameter bei der LS-Fourier-Transformation
$c_{xx}^2(f)$	Kohärenzspektrum
$C_{xy}(f)$	reeller Anteil eines Kreuzspektrums
c_{50}	Korrelation zwischen den überlappenden Segmenten bei der WOSA-Methode
d_0, d_1, d_2	reelle Parameter einer Filterfunktion
$d_f(t)$	kontinuierliche Filterfunktion
$d_f(t, k)$	kontinuierliche Filterfunktion des k -ten Segmentes
f	Frequenz
f_A	Abtastfrequenz
f_{Nyq}	Nyquist-Frequenz
$F_0(\omega_k)$	Parameter bei der LS-Fourier-Transformation
g	Teststatistik für den Test nach Fisher
g_f	kritischer Wert für den Test nach Fisher
g_s	kritischer Wert für den Test nach Siegel
$g(t)$	Interpolationsfunktion
$G_{xx}(f)$	einseitiges Autospektrum
$G_{xy}(f)$	einseitiges Kreuzspektrum
$H(f)$	Übertragungsfunktion
i	Index bzw. $\sqrt{-1}$
k	Index, Verschiebungsparameter
K	Anzahl der Eigenspektren bei der MT-Methode
L	Anzahl der Datenpunkte in jedem überlappendem Segment
m	Anzahl der unabhängigen Frequenzen in einem Periodogramm
m_t	nicht periodische, deterministische Komponente einer Zeitreihe
M	maximale Verschiebung bei der BT-Methode
n	Anzahl der Freiheitsgrade
n_d	Anzahl der nicht überlappenden Segmente
n_{eff}	effektive Anzahl der Segmente unter Berücksichtigung der Korrelation
n_k	ganzzahliger Parameter
n_{50}	Anzahl der überlappenden Segmente bei der WOSA-Methode
N	Anzahl von Punkten in einer Zeitreihe

O_k	Ordnung einer Intermodulationsfrequenz
p_k	ganzzahliger Parameter
$P(f)$	Periodogramm
q_k	ganzzahliger Parameter
$Q_{xy}(f)$	imaginärer Anteil eines Kreuzspektrums
S/N	Signal-Rauschverhältnis
$S_{xx}(f)$	zweiseitiges Autospektrum
t, t_k	kontinuierliche bzw. diskrete Zeit
T	Zeitdauer
T_d	zeitliche Länge von Segmenten
T_p	Periodendauer einer Schwingung
T_λ	Teststatistik für den Test nach Siegel
$t_{\lambda;\alpha}$	kritischer Wert für den Test nach Siegel
$v(t)$	kontinuierliche Zeitreihe unendlicher Länge
$V(f)$	Fourier-Transformierte von $v(t)$
$w(t)$	Fensterfunktion im Zeitbereich
$W(f)$	Fensterfunktion im Frequenzbereich
$w_{k,m}$	diskretes dpss-Fenster
$x(t), x(t_k)$	kontinuierliche bzw. diskrete Zeitreihe
$x'(t)$	gefilterte Zeitreihe
$X(f), X_k$	kontinuierliche bzw. diskrete Fourier-Transformierte
z	kritischer Wert für den Test nach Scargle
z_α	Quantile der Normalverteilung
z_{xy}^2	kritisches Kohärenzniveau

Griechische Symbole:

α	Signifikanzniveau
β_w	normalisierte Bandbreite
γ	Testparameter für den Test nach Scargle
$\gamma_{xx}(k)$	Autokovarianzfunktion
$\gamma_{xy}(k)$	Kreuzkovarianzfunktion
Δf	fundamentale Frequenzauflösung
Δt	zeitlicher Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Beobachtungen
ϵ_r	relativer Standardfehler
$\epsilon_r, \epsilon(t)$	Zufallskomponente einer Zeitreihe
λ	Parameter für den Test nach Siegel
μ	Mittelwert einer Zeitreihe
σ_x^2, σ_x	Varianz bzw. Standardabweichung der Zeitreihe $x(t)$
τ	zeitliche Verzögerung
$\tau(\omega_k)$	Parameter bei der LS-Fourier-Transformation
ϕ	Phasenverschiebung

$\phi_{xy}(f)$	Phasenspektrum
χ^2	Chi ² -verteilte Zufallsvariable
χ_n^2	Chi ² -Verteilung mit n Freiheitsgraden
ψ	Phasenwinkel
ω_k	Argument bei der LS-Fourier-Transformation
Ω_t	periodische Komponente einer Zeitreihe
$\rho_{xx}(k)$	Autokorrelationsfunktion
$\rho_{xy}(k)$	Kreuzkorrelationsfunktion

Sonstige Abkürzungen:

$N(\mu, \sigma^2)$	normalverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert μ und Varianz σ^2
\bar{x}	arithmetischer Mittelwert von x_1, x_2, \dots, x_N
$ x $	Betrag von x
\tilde{x}	nicht konsistente Schätzung der Größe x
\hat{x}	konsistente Schätzung der Größe x
$b[]$	systematischer Fehler eines Schätzers
$E[]$	Erwartungswert eines Schätzers
$\epsilon_r[]$	relativer Standardfehler einer Größe
$\sigma[]$	Standardabweichung einer Größe
$\text{Var}[]$	Varianz einer Größe
\mathcal{F} bzw. \mathcal{F}^{-1}	Fourier-Transformation bzw. inverse Fourier-Transformation
BT	Blackman-Tukey
dB	Dezibel
DSDP	Deep Sea Drilling Project
ENVFRQ	'envelope frequency' in ENVELOPE
HIFAC	'high frequency factor' in SPECTRUM
LS	Lomb-Scargle
MT	Multi-Taper
ODP	Ocean Drilling Program
OFAC	'oversampling factor' in SPECTRUM
PDB	Pee-Dee-Belemnite
SST	sea-surface temperature
WOSA	Welch-Overlapped-Segment-Averaging
WFAC	'window factor' bestimmt Segmentlänge in ENVELOPE

Um eine konsistente Schreibweise zwischen den Programmausgaben und dem Text zu erhalten, wurde im Text die **englische Dezimalschreibweise** verwendet (Punkt als Dezimaltrennzeichen).

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Grundlagen der Spektralanalyse	3
2.1 Begriffe	3
2.2 Auto- / Kreuzkovarianzfunktion - Auto- / Kreuzkorrelationsfunktion	6
2.3 Stationarität	8
2.4 Fourier-Transformation	9
3 Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse	11
3.1 Autospektrum	11
3.2 Schätzen kontinuierlicher Autospektren	15
3.2.1 Spektraler Leckeffekt, Fensterfunktionen und Bandbreite	22
3.2.2 'Aliasing'-Effekte	32
3.3 Lomb-Scargle- (LS-) Methode: Fourier-Transformation nicht äquidistanter Daten	34
3.4 Thomson-Multitaper- (MT-) Methode	38
3.5 Blackman-Tukey- (BT-) Methode	39
4 Harmonische Analyse	41
4.1 Tests für harmonische Komponenten in weißem Rauschen	41
4.2 Tests für harmonische Komponenten in farbigem Rauschen	44
5 Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse	47
5.1 Kreuzspektrum	47
5.2 Kohärenzspektrum	49
5.3 Phasenspektrum	53
5.4 Hinweise zur Anwendung der BT- und LS-Methode	59
6 Datenvorbereitung	61
6.1 Interpolationsverfahren	61
6.2 Dezimierung	65
6.3 Tests auf Stationarität / Gegenmaßnahmen bei Nichtstationarität	66
7 Das Programm SPECTRUM	71
7.1 Allgemeines	71
7.2 Dateiformate	73
7.3 Benutzung	74
7.3.1 Univariate Spektralanalyse	75
7.3.2 Harmonische Analyse	77
7.3.3 Bivariate Spektralanalyse	79
7.3.4 Utilities	80

8 Spektralanalyse anhand von Beispielen	81
8.1 Autospektralanalyse künstlich generierter Zeitreihen	81
8.1.1 Autoregressiver Prozeß zweiter Ordnung	81
8.1.2 Varianzanteile harmonischer Signalkomponenten	83
8.1.3 Arbeitsbereiche bei der Spektralanalyse	85
8.1.4 Effekt eines linearen Trends	86
8.2 Autospektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen	88
8.2.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Daten ODP Site 658	88
8.3 Harmonische Analyse anhand von Beispielen	90
8.3.1 Details zur praktischen Durchführung	90
8.3.2 Harmonische Analyse am Beispiel von Strontiumisotopenverhältnissen	93
8.3.3 Harmonische Analyse von Residuen	95
8.4 Kreuzspektralanalyse künstlich generierter Zeitreihen	98
8.4.1 Bivariater autoregressiver Prozeß erster Ordnung	98
8.4.2 Details zu Phasenspektren	99
8.5 Kreuzspektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen	103
8.6 Notwendige Angaben zur Beurteilung von Analyseresultaten	108
9 Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen	109
9.1 Allgemeines	109
9.2 Schätzung von Hüllkurven	110
9.2.1 Prinzip	110
9.2.2 Das Programm ENVELOPE	113
9.2.3 Plio-/Pleistozäne Entwicklung der 100 ka-Hüllkurve	115
10 Schlußfolgerungen	119
10.1 Methodik	119
10.2 Paläoklimatische Fragestellungen	120
Literaturverzeichnis	121
Anhang	127
Danksagung	131

1 Einleitung

Eine zentrale Fragestellung in der Geologie ist die Erfassung und Interpretation der zeitlichen Abfolge von 'Veränderungen' der Umwelt im Verlauf der Erdgeschichte. Diese Veränderungen können in ihrer zeitlichen und räumlichen Dimension stark variieren. Die geologisch erfaßbaren Zeitskalen, auf denen diese Veränderungen stattfinden, reichen von Monaten bis zu einigen hundert Millionen Jahren. Zur Deutung solcher Veränderungen ist es notwendig, den grundsätzlichen zeitlichen Charakter dieser Veränderungen möglichst genau zu erfassen, d.h. die Frage zu beantworten, ob es sich bei einem Prozeß um ein einmaliges Ereignis, ein episodisches oder ein periodisches Auftreten handelt.

Als Schwerpunkt werden in dieser Einführung zyklische Veränderungen des globalen Klimas während des Plio-/Pleistozäns betrachtet, wobei das betrachtete Zeitintervall der Veränderungen in der Größenordnung zwischen einigen tausend Jahren (ka) und wenigen Millionen Jahren (Ma) liegt. Von zentraler Bedeutung ist dabei die sog. Milanković-Theorie, wonach periodische Veränderungen in der Geometrie der Erdbahn zu Schwankungen der geographischen Verteilung der solaren Einstrahlung führen und für den Wechsel von Kalt- und Warmzeiten im Plio-/Pleistozän zumindest mitverantwortlich sind. Die Hauptperioden der Einstrahlungsschwankungen betragen ca. 404, 127, 96, 41, 23 und 19 ka (gewichtete Mittelwerte aus Berger und Loutre [1991]). Die bahnbrechende Entdeckung von Hays et al. (1976), daß diese Perioden sich im Sedimentationsgeschehen des Indischen Ozeans während des Pleistozäns widerspiegeln, hat in der Folgezeit zu einer intensiven Suche nach diesen sog. Milanković-Perioden in den verschiedensten pleistozänen Klimaindikatoren geführt (z.B. Imbrie et al., 1992, 1993). Daneben wurden Hinweise auf die Gegenwart der Milanković-Perioden in Sedimenten für weite Abschnitte des Phanerozoikums beschrieben (eine neue Zusammenfassung findet sich bei Schwarzacher [1993]).

Ein wesentliches Hilfsmittel zur Entschlüsselung der möglichen Klimasteuerung durch periodische Veränderungen der Erdbahn bildet die Spektralanalyse, die das Aufspüren periodischer Komponenten in einer Beobachtungsreihe ermöglicht. Dazu wird in der Regel ein von Blackman und Tukey (1958) entwickeltes Rechenschema verwendet. Leider stellt diese Methode gewisse Anforderungen an die verwendeten Daten, wodurch die direkte Anwendung auf typisch geologische Datensätze ausgeschlossen ist.

Diese Einführung in die Spektralanalyse verfolgt zwei Ziele: Zum einen sollen die Grundlagen der Methodik und deren Anwendung auf geologische Datensätze erläutert werden. Dabei wird der Schwerpunkt auf der Anwendung und dem Erkennen möglicher Fehler bei der Spektralanalyse. Zum anderen sollen die speziell an paläoklimatische Fragestellungen angepaßten Programme SPECTRUM und ENVELOPE vorgestellt werden, die auf eine große Breite von paläoklimatischen Daten direkt anwendbar sind.

Der Text ist folgendermaßen gegliedert: In Abschnitt 2 werden zunächst die wesentlichen mathematischen Grundlagen der Spektralanalyse dargestellt. Daran anschließend werden Methoden zur Spektralanalyse einer Beobachtungsreihe beschrieben (Abschn. 3). Im 4. Abschnitt werden statistische Tests vorgestellt, mit denen das Vorhandensein bestimmter Signale in einer Beobachtungsreihe überprüft werden kann. Gegenstand des 5. Abschnittes sind Zusammenhänge zwischen zwei Beobachtungsreihen. Die Nachteile der von Blackman und Tukey (1958) beschriebenen Methode im Zusammenhang mit geologischen Datensätzen wird im 6. Abschnitt näher erläutert. Im Anschluß an eine ausführliche Beschreibung des

1. Einleitung

Programms (Abschn. 7) werden im 8. Abschnitt eine Vielzahl möglicher Fehlerquellen bei der Spektralanalyse anhand von künstlich generierten und gemessenen Datensätzen diskutiert. Abschließend (Abschn. 9) wird eine Methode zur Schätzung der langfristigen Klimaentwicklung vorgestellt und am Beispiel Pliozän/Pleistozäner Sauerstoffisotopendaten ($\delta^{18}\text{O}$) demonstriert.

2 Grundlagen der Spektralanalyse

2.1 Begriffe

Wird ein kontinuierlicher Prozeß $x(t)$, der eine Funktion der Zeit t ist, zu bestimmten Zeiten beobachtet, dann handelt es sich bei der so gewonnenen Beobachtungsreihe um eine **diskrete Zeitreihe**. Als Beispiel mögen die an einem Sedimentkern in bestimmten Abständen gemessenen Sauerstoffisotopenverhältnisse dienen, die die Veränderungen eines kontinuierlich ablaufenden Prozesses zu bestimmten Zeiten widerspiegeln. Die Sammlung der Beobachtungen kann folgendermaßen notiert werden:

$$x(t_k) = x_{t_1}, x_{t_2}, x_{t_3}, \dots, x_{t_N}.$$

Ist der zeitliche Abstand zwischen zwei Beobachtungen ($\Delta t = t_{i+1} - t_i$) konstant, dann spricht man von einer **äquidistanten** Zeitreihe. Die Beobachtungszeit T ist dann $T = (N-1)\Delta t$ bzw. $T = t_N - t_1$. Daneben existieren **nicht äquidistante** Zeitreihen, bei denen der zeitliche Abstand zwischen den Beobachtungen nicht länger konstant ist. In diesem Fall gibt $T = t_N - t_1$ zwar immer noch die gesamte Beobachtungszeit an, andererseits ist die Größe $\overline{\Delta t} = T/(N-1)$ jetzt als durchschnittliches Zeitintervall aufzufassen.

Periodische Prozesse lassen sich im einfachsten Fall als Sinusschwingung beschreiben; in Abbildung 1 ist ein entsprechendes Signal dargestellt. Formal läßt sich eine solche Schwingung folgendermaßen darstellen:

$$x(t) = A_0 \cdot \cos(2\pi f t - \psi),$$

darin bedeuten:

- A_0 : **Amplitude** des Signals; diese Größe markiert die maximale 'Auslenkung' der Schwingung (s. Abb. 1);
- f : **Frequenz** des Signals; Kehrwert der Zeitdauer einer vollen Schwingung, der sog. **Periodendauer**,
- T_p : $f = 1/T_p$ Eine hohe Frequenz entspricht also kurzen Periodendauern und umgekehrt;
- t : Zeit;
- ψ : **Phasenwinkel**; bestimmt zusammen mit der Amplitude die 'Auslenkung' zum Zeitpunkt $t = 0$; dabei gilt $360^\circ \equiv T_p$.

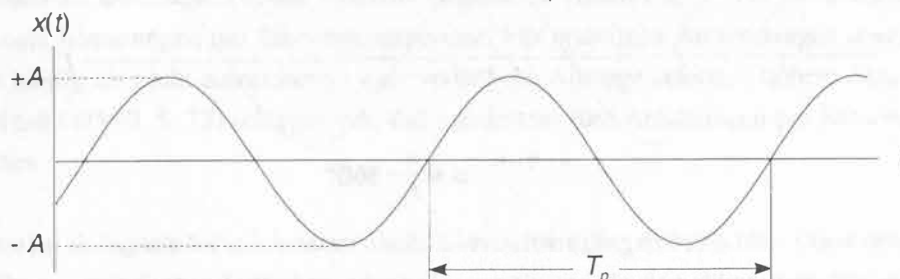


Abb. 1: Sinusschwingung mit der Amplitude A und der Periodendauer T_p .

2. Grundlagen der Spektralanalyse

Unter Ausnutzung der trigonometrischen Identität

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \sin \beta \mp \cos \alpha \cos \beta$$

ergibt sich

$$x(t) = A_0 \sin(2\pi f t) \sin(\psi) + A_0 \cos(2\pi f t) \cos(\psi) .$$

Wird $a \equiv A_0 \sin(\psi)$ und $b \equiv A_0 \cos(\psi)$ gesetzt, dann erhält man:

$$x(t) = a \sin(2\pi f t) + b \cos(2\pi f t) .$$

Der Phasenwinkel ψ ergibt sich aus dem Verhältnis der Koeffizienten a und b ; es gilt: $\psi = \tan^{-1}(a/b)$. Eine periodische Schwingung läßt sich also als lineare Kombination einer reinen Sinus- und Cosinuskomponente darstellen. Dieser Ansatz bildet die Grundlage für die im folgenden beschriebenen Methoden zur Spektralanalyse.

Zwei Sinusschwingungen mit beliebigen Amplituden, gleicher Frequenz und unterschiedlichen Phasenwinkeln führen zu einer **Phasenverschiebung** ϕ zwischen den beiden Signalen (Abb. 2). Darin kommt der zeitliche Abstand τ zwischen den Nulldurchgängen der beiden Signale zum Ausdruck:

$$\phi = \frac{\tau}{T_p} \cdot 360^\circ = \tau \cdot f_p \cdot 360^\circ . \quad (1)$$

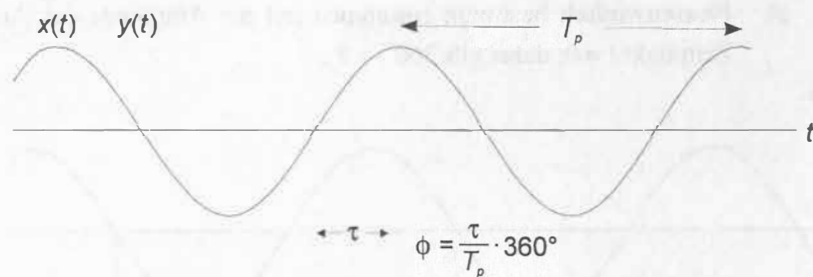


Abb.2: Phasenverschiebung zwischen zwei Sinusschwingungen gleicher Periodendauer T_p . Die Phasenverschiebung τ ist der zeitliche Abstand zwischen zwei phasengleichen Punkten von $x(t)$ und $y(t)$ (z.B. Nulldurchgänge). Der Phasenwinkel ϕ drückt die Phasenverschiebung in Grad aus.

Ein **rein harmonischer Prozeß** ist die Summe mehrerer periodischer Sinusschwingungen mit unterschiedlicher Amplitude, Frequenz und Phase (z.B. Priestley, 1989, S. 147):

$$x(t) = \sum_{i=1}^k A_i \cos(2\pi f_i t - \psi_i) .$$

Wird ein kontinuierliches Sinussignal durch die Beobachtung zu bestimmten Zeiten (= Abtastung) in ein diskretes Signal überführt, so spricht man von einer bestimmten **Abtastfrequenz** $f_A = 1/\Delta t$. Im Falle nicht äquidistanter Zeitreihen kann lediglich eine mittlere Abtastfrequenz angegeben werden, nämlich $\overline{f_A} = 1/\overline{\Delta t}$. Weiterhin ist zu beachten, daß nach dem **Abtasttheorem** von Shannon das abgetastete Signal nur dann alle Informationen über das Ausgangssignal enthält, wenn die Abtastfrequenz mindestens doppelt so hoch ist wie die höchste vorkommende Signalfrequenz (z.B. Lücke, 1992, S. 53): $f_A > 2f_{\max}$. Soll also ein kontinuierliches Signal mit einer bestimmten Frequenz ohne Informationsverlust als diskrete Zeitreihe dargestellt werden, dann muß für das Zeitintervall zwischen den Beobachtungen (= Abtastintervall, das die Abtastfrequenz festlegt) folgende Bedingung gelten:

$$\frac{1}{2 \Delta t} > f_{\max} .$$

Umgekehrt ergibt sich bei einem vorgegebenen Abtastintervall, Δt die höchste auflösbare Frequenz - die sog. **Nyquist-Frequenz**, f_{Nyq} zu:

$$f_{Nyq} = \frac{1}{2 \Delta t} . \quad (2)$$

Handelt es sich um eine nicht äquidistante Zeitreihe, so kann für die gesamte Zeitreihe nur eine durchschnittliche Nyquist-Frequenz angegeben werden. Abschnitte der Zeitreihe, in denen die lokale Abtastfrequenz höher als die durchschnittliche Abtastfrequenz ist, erlauben dann Rückschlüsse auf Signalanteile oberhalb der durchschnittlichen Nyquist-Frequenz (s. Abschn. 3.3). Das Abtasttheorem erfordert theoretisch zwei Abtastungen pro Schwingungsperiode. Für praktische Anwendungen erweist sich dieser Wert jedoch häufig als nicht ausreichend - eine verlässliche Aussage erfordert höhere Abtastfrequenzen. Lechner und Lohl (1990, S. 73) schlagen vor, daß mindestens fünf Abtastungen pro Schwingungsperiode erfolgen sollten.

Bisher wurden als Signale lediglich harmonische Sinusschwingungen betrachtet. Diese erweisen sich bei der Beschreibung geologischer Zeitreihen jedoch als ungenügend, da sie vollkommen deterministisch sind. Zeitreihen natürlicher Prozesse weisen in der Regel neben periodischen Komponenten, \mathcal{Q}_t , eine zufällige Komponente, ϵ_t , auf. Weiterhin kann das Signal auch noch eine nicht periodische, deterministische Komponente, m_t , beinhalten. Letztere kann beispielsweise aus einem Trend bestehen. Formal läßt sich ein

2. Grundlagen der Spektralanalyse

solches Signal wie folgt darstellen:

$$x(t) = \Omega_t + m_t + \epsilon_t . \quad (3)$$

Die zufällige Komponente, ϵ_t , läßt sich statistisch beschreiben; häufig wird angenommen, daß ϵ normalverteilt ist: $\epsilon_t \sim N(0, \sigma_R^2)$. Analog zur Akustik werden diese zufälligen Signalanteile häufig als Rauschen bezeichnet.

2.2 Auto- / Kreuzkovarianzfunktion - Auto- / Kreuzkorrelationsfunktion

Als Autokovarianzfunktion einer Zeitreihe $x(t)$ wird eine Funktion bezeichnet, die die Abhängigkeit der beobachteten Werte zu einem bestimmten Zeitpunkt t von den vorhergehenden Werten beschreibt. Für äquidistante, diskrete Zeitreihen kann diese Funktion folgendermaßen geschätzt werden (z.B. Jenkins und Watts, 1968, S. 180):

$$\gamma_{xx}(k) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} (x_t - \bar{x}) \cdot (x_{t+k} - \bar{x}), \quad k = 0, 1, \dots, N-1 , \quad (4)$$

worin k der sog. Verschiebungsparameter ist und

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t$$

der Mittelwert der gesamten Zeitreihe ist¹.

Die Autokovarianzfunktion besitzt zwei wichtige Eigenschaften (z.B. Lechner und Lohl, 1990, S. 141):

- periodische Signale ergeben eine periodische Autokovarianzfunktion,
- die Autokovarianzfunktionen von Zeitreihen, die sich lediglich in der Phase unterscheiden, sind für alle Zeitreihen gleich, da die im Ausgangssignal enthaltene Phaseninformation bei der Berechnung unberücksichtigt bleibt,
- der Wert der Autokovarianzfunktion an der Stelle $k = 0$, also von $\gamma_{xx}(0)$, entspricht der Varianz von $x(t)$.

¹Obwohl die Summe in Gleichung 4 nur $(N-k)$ Summanden aufweist wird durch N geteilt. In der Praxis wird der hierdurch hervorgerufene systematische Fehler, der proportional zu k ist, jedoch in Kauf genommen, da in diesem Fall die Varianz der Schätzung für steigende k sinkt. Diese wichtige Eigenschaft wäre bei einer Normierung über $(N-k)$ nicht zu erzielen (vergl. Percival und Walden, 1993, S. 190f).

Aus Gleichung 4 ist leicht ersichtlich, daß der absolute Betrag einer Autokovarianzfunktion bei einem bestimmten Wert k von den tatsächlichen Werten von $x(t)$ bestimmt wird. Eine Normierung der Autokovarianzfunktionen über die Varianz von $x(t)$ gemäß

$$\rho_{xx}(k) = \frac{\gamma_{xx}(k)}{\gamma_{xx}(0)} = \frac{\gamma_{xx}(k)}{\sigma_x^2}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5)$$

worin

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{t=1}^N (x_t - \bar{x})^2$$

die Varianz der Zeitreihe ist, führt zur Autokorrelationsfunktion mit $[-1 \leq \rho_{xx}(k) \leq 1]$.

In Analogie zur Autokovarianzfunktion kann die Beziehung zwischen zwei Zeitreihen $x(t)$, $y(t)$ mit Hilfe der Kreuzkovarianzfunktion beschrieben werden. Im Fall diskreter, äquidistanter Zeitreihen wird für die Schätzung vorausgesetzt, daß die absoluten Beobachtungszeiten beider Zeitreihen identisch sind. Der Schätzer für die Kreuzkovarianzfunktion ist:

$$\gamma_{xy}(k) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} (x_t - \bar{x}) \cdot (y_{t+k} - \bar{y}), \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad (6a)$$

und für die Kreuzkorrelationsfunktion:

$$\rho_{xy}(k) = \frac{\gamma_{xy}(k)}{\gamma_{xy}(0)} = \frac{\gamma_{xy}(k)}{\sigma_x \sigma_y}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (6b)$$

2.3 Stationarität

Die meisten der folgenden Betrachtungen über Zeitreihen basieren auf der Annahme, daß die betreffenden Zeitreihen stationär sind. Darunter versteht man, daß die statistischen Momente (z.B. Mittelwert, Varianz) des beobachteten Prozesses - und damit auch der Zeitreihe - unabhängig von der *absoluten* Beobachtungszeit sind. Im Falle *einer* diskreten Zeitreihe bedeutet dies, daß die statistischen Eigenschaften eines relativ kurzen Intervalls sich nicht signifikant von den Eigenschaften der übrigen Intervalle unterscheidet. Mit signifikant ist dabei gemeint, daß die tatsächlichen Schwankungen größer sind, als durch zufällige Fluktuationen zu erwarten wäre (Bendat und Piersol, 1986, S. 10f).

Da nur sehr wenige Prozesse dieser strengen Anforderung genügen, wird für die meisten Betrachtungen in der Zeitreihenanalyse eine abgeschwächte Definition herangezogen, die der sog. **schwachen Stationarität** oder auch Stationarität zweiter Ordnung. Hierbei werden nicht mehr sämtliche Momente betrachtet, sondern nur noch der Mittelwert und die Autokovarianzfunktion in Abhängigkeit von der absoluten Beobachtungszeit. Es sei $x_i \equiv x(t_i)$ eine diskrete, äquidistante Zeitreihe, die in Intervalle der Länge k unterteilt ist:

$$x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_N.$$

Der Mittelwert eines Intervalls ist dann:

$$\bar{x}(n, k) = \frac{1}{k} \sum_{i=n}^{n+k} x_i \quad (7a)$$

und die entsprechende Autokovarianzfunktion ist:

$$\gamma_{xx}(n, k) = \frac{1}{k} \sum_{i=n}^{n+k} (x_i - \bar{x}(n, k)) \cdot (x_{i+k} - \bar{x}(n, k)). \quad (7b)$$

Wenn sich die Eigenschaften aus Gleichungen 7a,b *nicht* signifikant mit der Zeit t ändern, dann wird die Zeitreihe $x(t_i)$ als schwach stationär bezeichnet. Es sei allerdings darauf hingewiesen, daß diese Definition nicht ausschließt, daß die Autokovarianzfunktion in Abhängigkeit von der Intervalllänge τ variiert.

2.4 Fourier-Transformation

Die Beschreibung von Prozessen geschah bisher im Zeitbereich, d.h. eine Größe wurde als Funktion der Zeit beschrieben. Derselbe Prozeß läßt sich aber auch im **Frequenzbereich** beschreiben, d.h. mit Hilfe von Amplituden als Funktion der Frequenz. Die Übertragung zwischen diesen Bereichen geschieht mit Hilfe der Fourier-Transformation (z.B. Bendat und Piersol, 1986, S. 539):

$$X(f) = \mathcal{F} x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i2\pi ft} dt, \quad -\infty < f < \infty, \quad (8)$$

bzw.

$$X(f) = \mathcal{F} x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \cos(2\pi ft) - ix(t) \sin(2\pi ft) dt.$$



Die Fourier-Transformation $x(t) \rightarrow X(f)$ stellt eine lineare Operation dar, d.h. $X(af + b) = a X(f) + b$. Es ist weiterhin zu beachten, daß $X(f)$ symmetrisch ist, d.h. $X(f) = X(-f)$. Durch die Fourier-Transformation ist es möglich, die in einer stationären Zeitreihe $x(t)$ enthaltenen deterministischen (nicht notwendigerweise periodischen) und stochastischen Komponenten als infinite Folge von Sinus- und Cosinusfunktionen mit unterschiedlicher Frequenz und Amplitude darzustellen (z.B. Priestley, 1989, S. 243f).

Für praktische Anwendungen ist die obige Definition (Gl. 8) jedoch ungeeignet, da Zeitreihen nur eine endliche Länge besitzen und außerdem im allgemeinen als diskrete Folge von Beobachtungen vorliegen. Unter der Annahme, daß N äquidistante Beobachtungen vorliegen und N gerade ist, lassen sich folgende Vereinbarungen treffen:

$$x_k \equiv x(t_k), \quad t_k \equiv k \cdot \Delta t, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (9)$$

Weiterhin soll die Fourier-Transformation nur für Frequenzen f_n im Intervall $[-f_{Nyq}, f_{Nyq}]$ bestimmt werden. Mit Gleichung 2 ergibt sich:

$$f_n = \frac{n}{N \cdot \Delta t}, \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}. \quad (10)$$

Wird nun das Integral in Gleichung 8 durch eine Summe angenähert, dann erhält man unter Anwendung von Gleichungen 9 und 10 einen Ausdruck für die sog. **diskrete Fourier-Transformation** (z.B. Percival und Walden, 1993, S. 110f):

2. Grundlagen der Spektralanalyse

$$X_n \equiv X(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i2\pi f_n t} dt \approx \sum_{k=0}^{N-1} x_k e^{-i2\pi f_n t_k} \Delta t = \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} x_k e^{-i2\pi k n / N} \quad (11)$$

Die Werte X_n in Gleichung 11 werden auch als **Fourier-Komponenten** bezeichnet (Bendat und Piersol, 1986, S. 371).

Abbildung 3 zeigt schematisch den Übergang von der Zeit- in die Frequenzdomäne mittels der Fourier-Transformation. Abschließend sei darauf hingewiesen, daß eine Transformation der Form $X(f) \rightarrow x(t)$ ebenfalls möglich ist. Sie wird als inverse Fourier-Transformation bezeichnet und durch \mathcal{F}^{-1} gekennzeichnet.

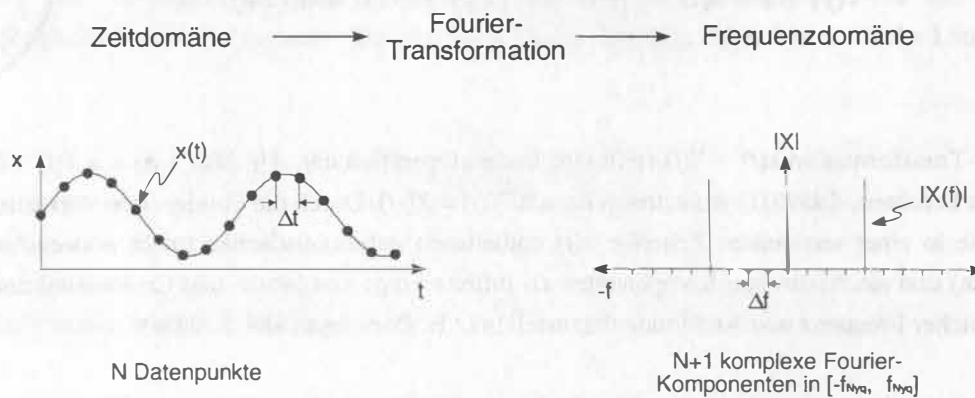


Abb. 3: Die diskrete Fourier-Transformation ermöglicht den Übergang von der Zeit- in die Frequenzdomäne. Eine diskrete Zeitreihe $x(t)$ (Zeitintervall Δt) führt zu diskreten Fourier-Komponenten (Frequenzintervall Δf). Die komplexen Fourier-Komponenten sind symmetrisch um den Ursprung der Frequenzachse.

3 Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

In den folgenden Abschnitten werden die Grundlagen der Spektralanalyse einzelner Zeitreihen erläutert. Da man jede Beobachtungsreihe für sich betrachtet, spricht man auch von einer univariaten Spektralanalyse.

3.1 Autospektrum

Bisher wurde die Fourier-Transformation lediglich aus einem mathematischen Blickwinkel betrachtet. Um dieses Werkzeug für die Auswertung geologischer Daten $x(t)$ nutzen zu können, ist noch ein weiterer Schritt notwendig, der die Beziehung zwischen der Fourier-Transformierten einer Zeitreihe $X(f)$ und interpretierbaren physikalischen Größen herstellt.

Betrachtet man z.B. ein Pendel, dann ist dessen Schwingungsenergie proportional zum Quadrat der Amplitude der Pendelausschläge. Um die Schwingungsenergie im Frequenzbereich wiederzugeben, benutzt man das **Parsevalsche Theorem**, das eine Art 'Energieerhaltungssatz' für Transformationen zwischen Zeit- und Frequenzbereich darstellt. Für die Gesamtenergie E eines schwach stationären Prozeß $x(t)$ gilt danach (Kay und Marple, 1981):

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} x(t)^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |X(f)|^2 df, \quad (12a)$$

d.h. $\{|X(f)|^2 df\}$ stellt den Anteil an der Gesamtenergie des Prozesses im Frequenzintervall $[f, f+df]$ dar. Oder anders ausgedrückt: die in $x(t)$ enthaltene Energie wird als Funktion der Frequenz dargestellt (Priestley, 1989, S. 204). Für eine diskrete Zeitreihe lautet das Parsevalsche Theorem (Kay und Marple, 1981):

$$E \approx \sum_{n=1}^N x_n^2 \Delta t = \sum_{k=1}^N |X_k|^2 \Delta f, \quad (12b)$$

worin Δf die sog. **fundamentale Frequenzauflösung** der Fourier-Transformation ist. Da die Fourier-Transformation an $N + 1$ Frequenzen im Intervall $[-f_{N/4}, f_{N/4}]$ durchgeführt wird (vergl. Gl. 10), ergibt sich zusammen mit Gleichung 2:

$$\Delta f = \frac{2f_{N/4}}{N+1} \approx \frac{1}{\Delta t \cdot N} = \frac{1}{T}. \quad (13)$$

Die fundamentale Frequenzauflösung ist also der Abstand zwischen zwei benachbarten Fourier-Komponenten auf der Frequenzachse (vergl. Abb. 3). Wird Gleichung 12b durch die Gesamtzeit T der Zeitreihe dividiert, dann ergibt sich ein Ausdruck für die in $x(t)$ enthaltene Leistung (Energie / Zeit = Leistung):

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

$$\frac{1}{T} \sum_{n=1}^N x_n^2 \Delta t = \frac{1}{T} \sum_{k=1}^N |X_k|^2 \Delta f ,$$

und weiterhin mit $T = N \cdot \Delta t$

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n^2 = \frac{1}{N \Delta t} \sum_{k=1}^N |X_k|^2 \Delta f . \quad (14)$$

Außerdem gilt für die **Varianz** einer mittelwertfreien ($\mu_x = 0$) Zeitreihe $x(t)$ (z.B. Percival und Walden, 1993, S. 136):

$$\sigma_x^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n^2 .$$

Dies entspricht genau dem linken Ausdruck in Gleichung 14. Wird $|X(f)|^2$ als Funktion der Frequenz f dargestellt, dann entspricht die Fläche unterhalb dieser Funktion multipliziert mit $1/T$ genau der Varianz von $x(t)$. Oder anders ausgedrückt: die in $x(t)$ enthaltene Varianz kann als Funktion der Frequenz analysiert werden. Die so gewonnene Funktion wird wegen der symmetrischen Frequenzachse (vergl. Gl. 10) als zweiseitiges Auto-, Leistungsdichte-, Leistungs-, Varianz- oder Powerspektrum bezeichnet:

$$S_{xx}(f) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N \Delta t} E [|X(f)|^2] , \quad -\infty < f < \infty .$$

Aufgrund der Symmetrie des Autospektrums, d.h. $S_{xx}(-f) = S_{xx}(f)$, wird üblicherweise nur der Frequenzbereich $0 \leq f < \infty$ berücksichtigt und als einseitiges Autospektrum, $G_{xx}(f)$ bezeichnet:

$$G_{xx}(f) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N \Delta t} E [|X(f)|^2] , \quad 0 \leq f < \infty .$$

In Abbildung 4 sind die theoretischen Autospektren einiger Signale dargestellt. Besteht das Signal aus einer Sinusschwingung, dann wird die Varianz des Signals einzig durch diese Schwingung bestimmt. Dementsprechend erscheint im Autospektrum (Abb. 4a) nur ein 'schmales' Maximum, nämlich genau bei der Frequenz der Sinusschwingung. Besteht das Signal aus normalverteilten Zufallszahlen, $x(t) \sim N(0, \sigma_R^2)$, dann erhält man das in Abbildung 4b gezeigte Leistungsspektrum. In diesem Fall ist $G_{xx}(f)$ unabhängig von der Frequenz; die Fläche unterhalb von $G_{xx}(f)$ multipliziert mit $1/T$ ist genau σ_R^2 . In Analogie zur Optik werden solche Signale als **weißes Rauschen** bezeichnet. Bei der Analyse natürlicher Prozesse findet man

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

häufig Spektren, die dem in Abbildung 4c dargestellten Spektrum ähneln. Das Autospektrum zeigt einen kontinuierlichen Verlauf mit einem oder auch mehreren lokalen Maxima. Das bedeutet, daß die im Signal vorhandene Varianz nicht gleichmäßig über den Frequenzbereich verteilt ist, sondern daß höhere Varianzanteile mit bestimmten Frequenzbereichen verbunden sind. Ebenfalls in Anlehnung an die Optik wird diese Art von Spektralverlauf als **farbiges Rauschen** bezeichnet. Abbildung 4d zeigt einen speziellen Fall von farbigem Rauschen, bei dem die Amplitude mit sinkender Frequenz kontinuierlich ansteigt. Dieser Spektralverlauf wird als **rotes Rauschen** bezeichnet. Es ist zu beachten, daß farbiges und rotes Rauschen im Vergleich zu weißem Rauschen ($G_{xx}(f) = \text{konstant}$) *nicht eindeutig* definiert sind. Diese Ausdrücke beschreiben lediglich eine generelle Tendenz von $G_{xx}(f)$.

Da in einem Autospektrum die *Beträge* der komplexen Fourier-Komponenten als Funktion der Frequenz dargestellt werden, gehen die in einer Zeitreihe enthaltenen Phaseninformationen verloren, da letztere in den imaginären Komponenten von $X(f)$ enthalten sind. Dies ist schematisch in Abbildung 5 dargestellt.

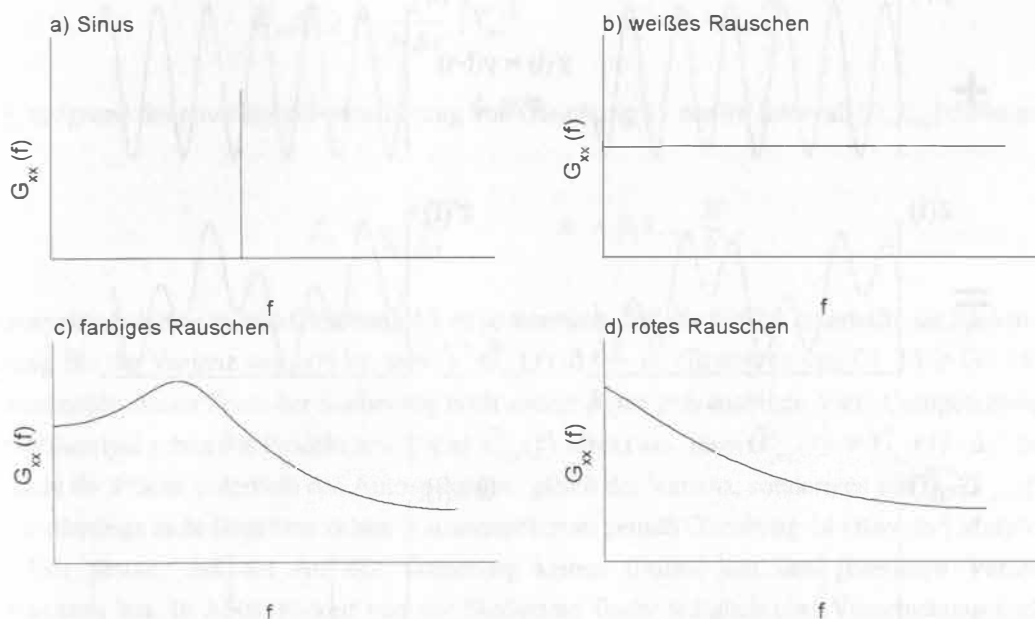


Abb. 4: Theoretische Autospektren verschiedener Prozesse (nach Bendat und Piersol, 1986).

Jedes integrierbare Spektrum¹ läßt sich mit Hilfe des **Lebesgue-Zerlegungstheorems** in einen diskreten (= harmonischen) und einen kontinuierlichen Teil aufspalten (z.B. Percival und Walden, 1993, S. 141). In Anlehnung an die einfachen Spektren aus Abbildung 4 werden Spektren verschiedener Prozesse dann folgendermaßen klassifiziert:

¹Ein Spektrum ist absolut integrierbar, wenn gilt: $\int_{-f_{xyq}}^{f_{xyq}} |X(f)|^2 df < \infty$.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

- rein harmonische Prozesse ergeben sog. **rein diskrete Autospektren** oder **Linienpektren**;
- Autospektren ohne ausgeprägte Maxima, wie z.B. die von weißem bzw. farbigem Rauschen, werden als **rein kontinuierliche Spektren** bezeichnet,
- harmonische Prozesse in Verbindung mit einem weißem Rauschen führen zu **diskreten Autospektren**;
- harmonische Prozesse und ein beliebiges (farbiges) Rauschen bilden **gemischte Autospektren**.

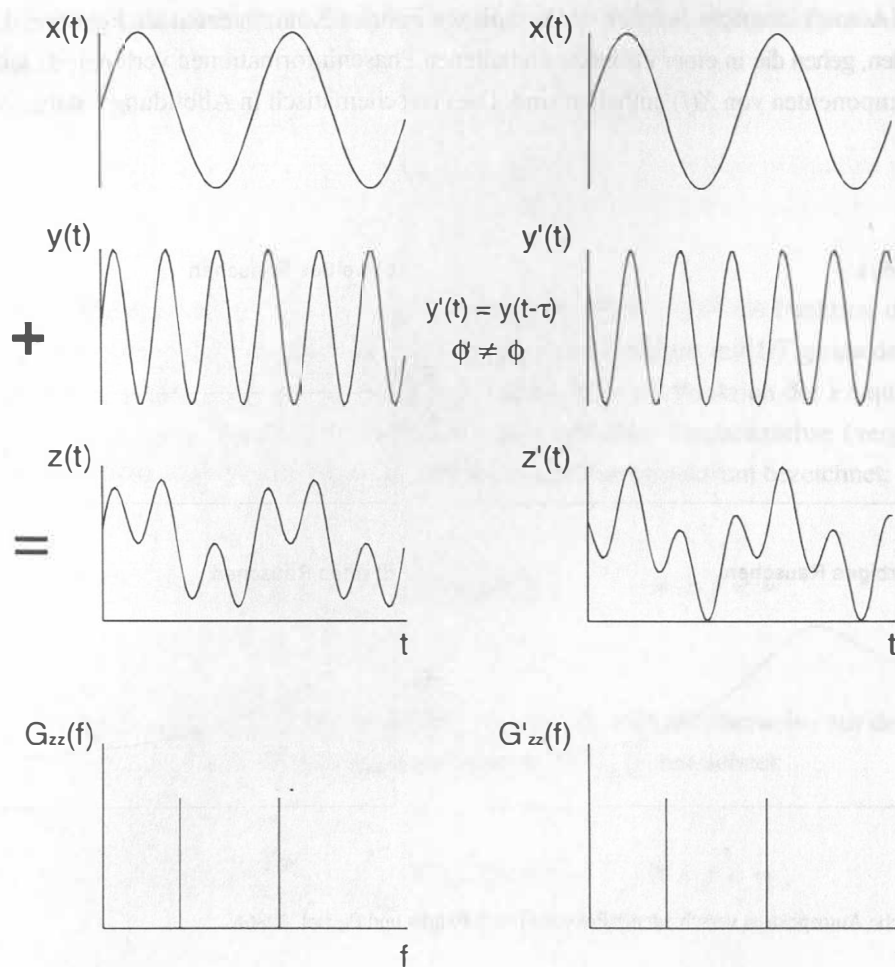


Abb. 5: Verlust der Phaseninformation im Autospektrum. Die Zeitreihen $z(t)$ und $z'(t)$ entstehen durch Addition zweier sinusförmiger Schwingungen $x(t)$ und $y(t)$ bzw. $y'(t)$, die in beiden Fällen die gleiche Frequenz besitzen. $y'(t)$ ist allerdings gegenüber $y(t)$ um τ entlang der Zeitachse verschoben. Diese Phasenverschiebung führt zu dem unterschiedlichen Erscheinungsbild der Zeitreihen $z(t)$ und $z'(t)$. Trotz dieses Unterschiedes in der Zeitdomäne sind die entsprechenden Autospektren $G_{zz}(f)$ und $G'_{zz}(f)$ identisch, da die Information über die Phasenverschiebung durch die Darstellung der Absolutbeträge der Fourier-Komponenten im Autospektrum verloren geht.

3.2 Schätzen kontinuierlicher Autospektren

Im vorherigen Abschnitt wurde das Autospektrum einer endlichen Zeitreihe als Integral über einen unendlichen Frequenzbereich definiert. Im folgenden soll es darum gehen, das Autospektrum eines Prozesses zu schätzen, wenn als Datenbasis lediglich eine diskrete, schwach stationäre Zeitreihe, $x(t_k)$ vorliegt, die aus N Beobachtungen besteht. Vereinfachend wird zunächst weiter angenommen, daß die Zeitreihe äquidistant ist. Genau genommen gelten die folgenden Aussagen und Methoden nur für Prozesse mit rein kontinuierlichen Spektren. In der Praxis werden diese jedoch auch zur Analyse von Prozessen mit diskreten bzw. gemischten Spektren eingesetzt. Aussagen über das Vorhandensein harmonischer Komponenten werden in diesen Fällen durch die sog. Harmonische Analyse gemacht (s. Abschn. 4).

Ausgehend von Gleichung 14 ergibt sich ein möglicher Ansatz zur Schätzung des einseitigen Autospektrums mit Hilfe der diskreten Fourier-Transformierten (Gl. 11) an $N/2+1$ diskreten Frequenzen (Bendat und Piersol, 1986, S. 392):

$$\tilde{G}_{xx}(f_n) = \frac{2}{N\Delta t} |X_n|^2 \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad (15)$$

wobei f_n aufgrund der einseitigen Formulierung von Gleichung 15 nur im Intervall $[0, f_{N/2}]$ definiert ist:

$$f_n \equiv \frac{n}{N \cdot \Delta t} \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}.$$

Der Autospektralschätzer gemäß Gleichung 15 ist so normiert, daß die Fläche unterhalb des Spektrums eine Schätzung für die Varianz von $x(t)$ ist, also $\sum \tilde{G}_{xx}(f) \cdot \Delta f = \sigma_x^2$ (Einsetzen von Gl. 15 in Gl. 14). In der Praxis sind neben dieser Form der Skalierung noch andere Arten gebräuchlich: Viele Computerprogramme zur Spektralanalyse geben das Produkt aus Δf und $\tilde{G}_{xx}(f)$ direkt aus, also $\tilde{G}'_{xx}(f) \equiv \tilde{G}_{xx}(f) \cdot \Delta f$. In diesem Fall ist nicht die Fläche unterhalb des Autospektrums gleich der Varianz, sondern es gilt $\sum \tilde{G}'_{xx}(f) = \sigma_x^2$. Dieses ist allerdings nicht länger ein 'echtes' Varianzspektrum gemäß Gleichung 14 (Kay und Marple, 1981). Es sei hier betont, daß die Art der Skalierung keinen Einfluß auf den generellen Verlauf eines Autospektrums hat. In Abhängigkeit von der Skalierung findet lediglich eine Verschiebung entlang der Ordinate statt.

Der diskrete Autospektralschätzer nach Gleichung 15, der als **Periodogramm** oder **Rohspektrum** bezeichnet wird, ist allerdings weder ein erwartungstreu noch ein konsistenter Schätzer² für das tatsächliche Leistungsspektrum, das $x(t)$ zugrunde liegt; die zugrundeliegenden Ursachen sollen im folgenden näher erläutert werden.

² Ein Schätzer heißt im statistischen Sinne erwartungstreu, wenn der systematische Fehler des Schätzers möglichst gering ist. Ein Schätzer ist konsistent, wenn die Varianz des geschätzten Parameters gegen Null geht, wenn gleichzeitig die Anzahl der Beobachtungen gegen unendlich wächst (z.B. Sachs, 1992, S. 127).

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Die fundamentale Frequenzauflösung (Gl. 13) bestimmt die Genauigkeit, mit der das tatsächliche Spektrum entlang der Frequenzachse aufgelöst werden kann. Es ist unmöglich, spektrale Details, die dichter als Δf beieinander liegen, zu unterscheiden. In der Praxis ist die tatsächliche Auflösung bei der Spektralanalyse allerdings deutlich schlechter als dieser Wert (s. Abschn. 3.2.1).

Die diskrete Frequenzachse des Periodogramms kann einen systematischen Fehler in der Schätzung des Autospektrums verursachen. Stellt man sich die Frequenzachse ähnlich einer Histogrammabzisse vor (= Einteilung in Klassen), dann ist leicht einsehbar, dass die Werte $\tilde{G}_{xx}(f_k)$ eine Mittellung des zugrundeliegenden kontinuierlichen Spektrums $G_{xx}(f)$ über ein endliches Frequenzintervall darstellen. Der systematische Fehler wird dabei proportional zur ersten Ableitung des tatsächlichen Spektrums in dem entsprechenden Frequenzintervall sein.

Reelle und imaginäre Anteile (X_{rn} und X_{in}) der Fourier-Komponenten X_n (vergl. Gl. 11) lassen sich als Summe zweier unabhängiger, normalverteilter Zufallsvariablen auffassen (Bendat und Piersol, 1989, S. 284). Folglich können die Komponenten des Periodogramms folgendermaßen aufgliedert werden:

$$|X_n|^2 = X_{rn}^2 + X_{in}^2 ,$$

also als Summe zweier unabhängiger, quadrierter Zufallsvariablen. $|X_n|^2$ entspricht also einer Chi²-Zufallsvariablen mit 2 Freiheitsgraden. Darauf aufbauend kann die Häufigkeitsverteilung des Periodogramms hergeleitet werden:

$$\frac{\tilde{G}_{xx}(f)}{G_{xx}(f)} = \begin{cases} \frac{\chi_2^2}{2} & 0 < f < f_{N/4}, \\ \chi_1^2 & f = 0, f = f_{N/4}. \end{cases} \quad (16)$$

Die Periodogrammamplituden sind folglich wie eine Chi²-Zufallsvariable χ_n^2 mit n Freiheitsgraden verteilt (Percival und Walden, 1993, S. 221f). Die Reduzierung des Freiheitsgrades auf $n = 1$ bei $f = 0$ und $f = f_{N/4}$ kommt dadurch zustande, daß die imaginäre Komponente X_{in} bei diesen Frequenzen jeweils Null ist (vergl. Gl. 11 für $n = 0$ bzw. $n = N/2$). In der Praxis wird dieser Effekt in der Regel jedoch vernachlässigt (vergl. Bendat und Piersol, 1986, S. 284).

Entscheidend ist nun, daß das Resultat in Gleichung 16 unabhängig von der Länge der Zeitreihe (N) ist, d.h. eine längere Beobachtung desselben Prozesses hat keinen Einfluß auf die Häufigkeitsverteilung der Amplituden des Periodogramms und somit auf die Varianz der Schätzung (Bendat und Piersol, 1986, S. 284)! Hierin liegt die Ursache für die Inkonsistenz des Autospektralschätzers nach Gleichung 15. Wird die Anzahl der Beobachtungen eines Prozesses vergrößert (entweder durch eine längere Beobachtung oder durch kürzere Beobachtungsintervalle), dann steigt zwar die Informationsmenge über den zugrundeliegenden

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Prozeß an. Gemäß Gleichung 15 führt aber dieser Informationsgewinn lediglich dazu, daß das Periodogramm an einer wachsenden Zahl diskreter Frequenzen geschätzt wird, d.h. die Frequenzauflösung steigt. Die Varianz der Schätzung bleibt davon jedoch völlig unberührt.

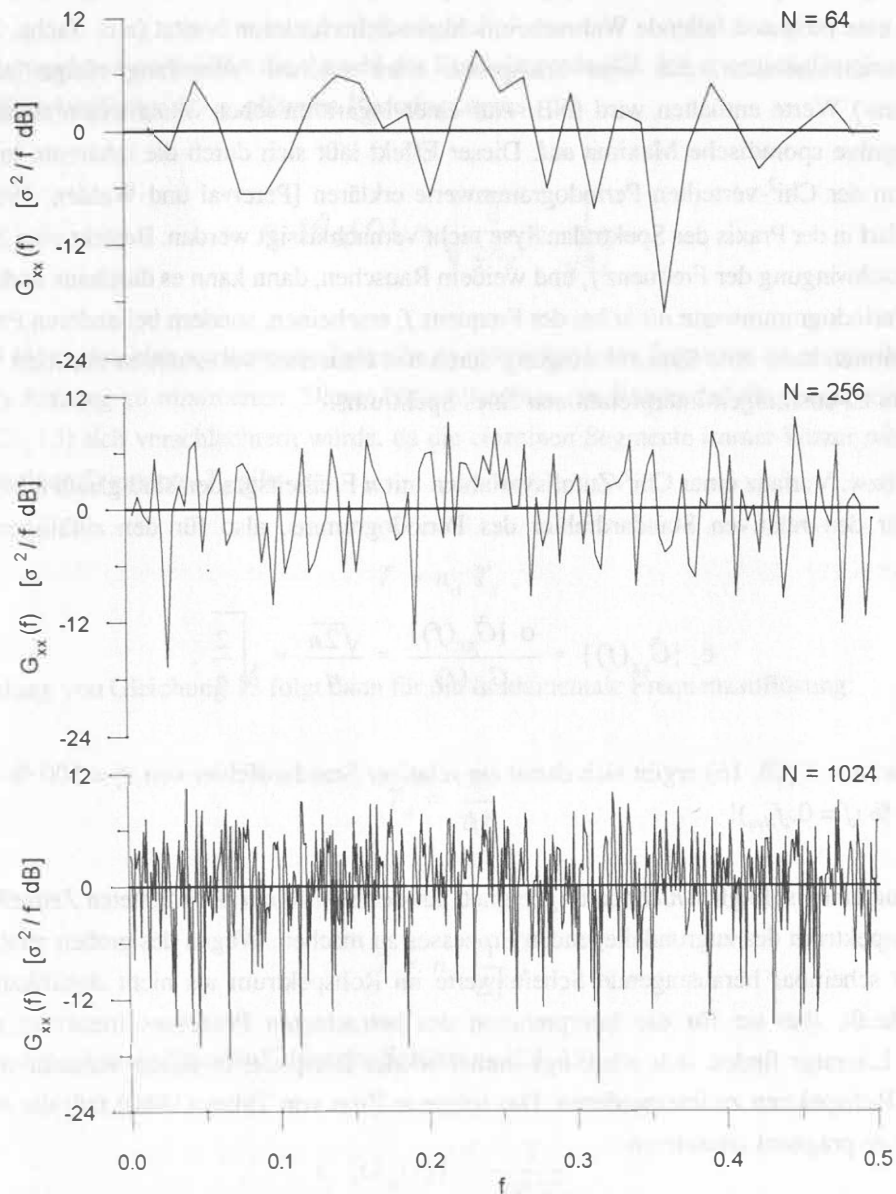


Abb. 6: Inkonsistenz des Periodogramms. Dargestellt sind die Periodogramme eines weißen Rauschprozesses (auf einer logarithmischen Dezibel-Skala), für Zeitreihen der Länge N . Da $\Delta t = 1$ ist ergibt sich eine Nyquist-Frequenz von $f_{Nyq} = 0.5$. Die waagerechte Linie markiert das theoretische Autospektrum. Es ist deutlich erkennbar, daß sich mit wachsender Länge der Zeitreihen, keine verbesserte Schätzung des tatsächlichen Autospektrums ergibt. (Nach Percival und Walden, 1993).

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Dieses Verhalten des Periodogramms wird in Abbildung 6 verdeutlicht, die Periodogramme von Zeitreihen unterschiedlicher Länge, die jeweils aus weißem Rauschen bestehen, zeigt. Anstelle der erwarteten horizontalen Linie (vergl. Abb. 4b) weisen die Periodogramme ein sehr unregelmäßiges Verhalten auf. Das zugrundeliegende tatsächliche Autospektrum des weißen Rauschens wird in einzelne zufällige Maxima und Minima aufgespalten, die jedoch *keine* physikalische Bedeutung im Sinne harmonischer Signalkomponenten besitzen ('**spurious peaks**'). Da eine χ^2 -Verteilung für einen bzw. zwei Freiheitsgrade eine monoton fallende Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion besitzt (z.B. Sachs, 1992, S. 211) ist es sehr wahrscheinlich, daß eine Stichprobe einer solchen Verteilung einige 'relativ große' (Periodogramm-) Werte enthalten wird (NB: Auf einer logarithmischen Skala treten anstelle positiver Ausreißer negative sporadische Maxima auf. Dieser Effekt läßt sich durch die inhärente logarithmische Transformation der χ^2 -verteilten Periodogrammwerte erklären [Percival und Walden, 1993, S. 228]). Dieser Effekt darf in der Praxis der Spektralanalyse nicht vernachlässigt werden. Besteht eine Zeitreihe z.B. aus einer Sinusschwingung der Frequenz f_s und weißem Rauschen, dann kann es durchaus vorkommen, daß die höchsten Periodogrammwerte *nicht* bei der Frequenz f_s erscheinen, sondern bei anderen Frequenzen. In solchen Situationen kann eine Sinusschwingung durch das Rauschen vollkommen maskiert werden; dies führt wiederum zu unsinnigen Interpretationen eines Spektrums.

Mittelwert bzw. Varianz einer χ^2 -Zufallsvariablen mit n Freiheitsgraden sind gleich n bzw. $2n$. Damit ergibt sich für den relativen Standardfehler des Periodogramms, also für den zufälligen Anteil des Schätzfehlers:

$$\epsilon_r [\tilde{G}_{xx}(f)] = \frac{\sigma [\tilde{G}_{xx}(f)]}{\tilde{G}_{xx}(f)} = \frac{\sqrt{2n}}{n} = \sqrt{\frac{2}{n}}. \quad (17)$$

Für $n = 2$ bzw. $n = 1$ (Gl. 16) ergibt sich damit ein relativer Standardfehler von $\epsilon_r = 100\%$ ($0 < f < f_{Nyq}$) bzw. $\epsilon_r = 140\%$ ($f = 0, f_{Nyq}$)!

Das Periodogramm ist folglich *nicht* dafür geeignet, auf der Basis einer beobachteten Zeitreihe Aussagen über das Autospektrum des zugrundeliegenden Prozesses zu machen. Wegen des großen relativen Fehlers müssen selbst scheinbar herausragende Scheitelwerte im Rohspektrum als nicht signifikant betrachtet werden, das heißt, daß sie für die Interpretation des betrachteten Prozesses irrelevant sind. In der geologischen Literatur finden sich allerdings immer wieder Beispiele, in denen versucht wurde, Daten aufgrund von Rohspektren zu interpretieren. Das folgende Zitat von Tukey (1980) faßt die Aussagekraft solcher Resultate prägnant zusammen:

More lives have been lost looking at the raw periodogram than by any other action involving time series!

Um zu einem konsistenten Schätzer für das Autospektrum zu kommen, genügt es in der Praxis, das Periodogramm zu glätten. Dazu wird die beobachtete Zeitreihe in n_d gleich lange und unabhängige Segmente der Länge N unterteilt. Anschließend werden gemäß Gleichung 15 die Periodogramme aller Segmente

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

bestimmt. Das geglättete Periodogramm ergibt sich schließlich aus der Mittelung der n_d Rohspektren (Bendat und Piersol, 1986, S. 392):

$$\hat{G}_{xx}(f_n) = \frac{2}{n_d N \Delta t} \sum_{i=1}^{n_d} |X_i(f_n)|^2 \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} . \quad (18)$$

Jedes der n_d Rohspektren vergrößert die Anzahl der Freiheitsgrade (Gl. 16) um zwei. Damit ergibt sich für den relativen Standardfehler des geglätteten Periodogramms:

$$\epsilon_r [\hat{G}_{xx}(f)] = \sqrt{\frac{2}{2n_d}} = \frac{1}{\sqrt{n_d}} . \quad (19)$$

Gleichung 19 legt nahe, eine vorliegende Zeitreihe in möglichst viele Segmente zu unterteilen, um so die Varianz der Schätzung zu minimieren. Dieses hätte allerdings zur Folge, daß die Frequenzauflösung des Spektrums (Gl. 13) sich verschlechtern würde, da die einzelnen Segmente immer kürzer würden. Für die Länge der einzelnen Segmente, T_d gilt:

$$T = n_d T_d ,$$

unter Anwendung von Gleichung 13 folgt dann für die fundamentale Frequenzauflösung:

$$T_d \approx \frac{1}{\Delta f} ,$$

und weiterhin

$$T \approx n_d \frac{1}{\Delta f} ,$$

und somit für den relativen Standardfehler der Schätzung (Gl. 19):

$$\epsilon_r [\hat{G}_{xx}(f)] \approx \frac{1}{\sqrt{T \cdot \Delta f}} . \quad (20)$$

Das bedeutet, daß Δf und ϵ_r bei konstanter Länge der Zeitreihe, T , nicht gleichzeitig minimiert werden können. Dieser fundamentale Zusammenhang wird als **Unsicherheitsprinzip** (z.B. Priestley, 1989, S.527) bezeichnet.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Um eine relativ fehlerfreie Spektralschätzung bei einer gleichzeitig hohen Auflösung zu erreichen, wäre es wünschenswert, anstelle der beschriebenen Segmentierung der Daten mehrere unabhängige Beobachtungsreihen desselben Prozesses zur Verfügung zu haben. Dieser Ansatz, der in technischen Anwendungen der Spektralanalyse eine große Rolle spielt, ist für die geologische Datenanalyse nicht zu verwirklichen, da in der Regel lediglich eine einzige Beobachtung vorliegt.

Welch (1967) hat jedoch einen möglichen Ausweg aus diesem Dilemma aufgezeigt, indem er eine Modifikation der beschriebenen Segmentierung einführte. Erlaubt man ein **Überlappen der Segmente**, dann lassen sich bei konstanter Länge der Zeitreihe mehr Segmente erzeugen und somit die Varianz der Schätzung verringern. Üblicherweise wird eine Überlappung der Segmente um 50% gewählt, so daß aus einer Zeitreihe der Länge N

$$n_{50} = \frac{2N}{L} - 1 \quad (21)$$

überlappende Segmente der Länge L gebildet werden können (Abb. 7). Da bestimmte Abschnitte der Zeitreihe nun aber in zwei Segmenten auftauchen, sind die Segmente nicht länger statistisch unabhängig voneinander. Somit kann keine Reduzierung des relativen Standardfehlers (Gl. 19) um den Faktor $\sqrt{n_{50}}$ erreicht werden. Berücksichtigt man jedoch die Korrelation zwischen den Segmenten, die durch die Überlappung entstehen, dann läßt sich eine effektive Zahl der Segmente bestimmen (Welch, 1967):

$$n_{eff} = \left[\frac{1}{n_{50}} \left(1 + 2c_{50}^2 - \frac{2c_{50}^2}{n_{50}} \right) \right]^{-1}, \quad (22)$$

worin c_{50} ein Korrekturfaktor für die Korrelation zwischen den überlappenden Segmenten ist. Für die bisher beschriebene Art der Autospektralschätzung ist $c_{50} = 0.5$ (Harris, 1978). Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, daß die Schätzung des Autospektrums als Mittelwert von Segmentperiodogrammen nur dann funktioniert, wenn die zugrundeliegende Zeitreihe stationär ist, d.h. $G_{xx}(f)$ muß zeitunabhängig sein!

Das Prinzip der Segmentüberlappung, das auch als WOSA-Methode (Welch's Overlapped Segment Averaging) bezeichnet wird, soll am folgenden Beispiel verdeutlicht werden (zur Vereinfachung werden Maßeinheiten weggelassen). Gegeben sei eine Zeitreihe mit: $N = 200$, $\Delta_t = 1$, $T = 200$. Zunächst soll der relative Standardfehler ohne Überlappung der Segmente bestimmt werden. Es wird $n_d = 4$ gewählt, so daß jedes Segment 50 Datenpunkte umfaßt. Aus Gleichung 13 ergibt sich $\Delta f = 1/50$ und weiterhin $\epsilon_r = 0.5$ (Gl. 19). Es soll nun der relative Standardfehler bei Anwendung der WOSA-Methode bestimmt werden, wobei die gleiche Frequenzauflösung erzielt werden soll: Aus $\Delta f = 1/50$ folgt $L = 50$ und $n_{50} = 7$ (Gl. 21). Die effektive Zahl der Segmente nach Gleichung 22 ist dann $n_{eff} = 4.9$, woraus $\epsilon_r = 0.45$ resultiert. Das heißt, daß bei gleicher spektraler Auflösung der relative Standardfehler um 10% reduziert werden konnte. Das ist zwar kein gewaltiger Fortschritt, aber im nächsten Abschnitt werden in Verbindung mit der WOSA-Methode noch weitere Maßnahmen zur Verringerung der Varianz des geschätzten Autospektrums erläutert.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

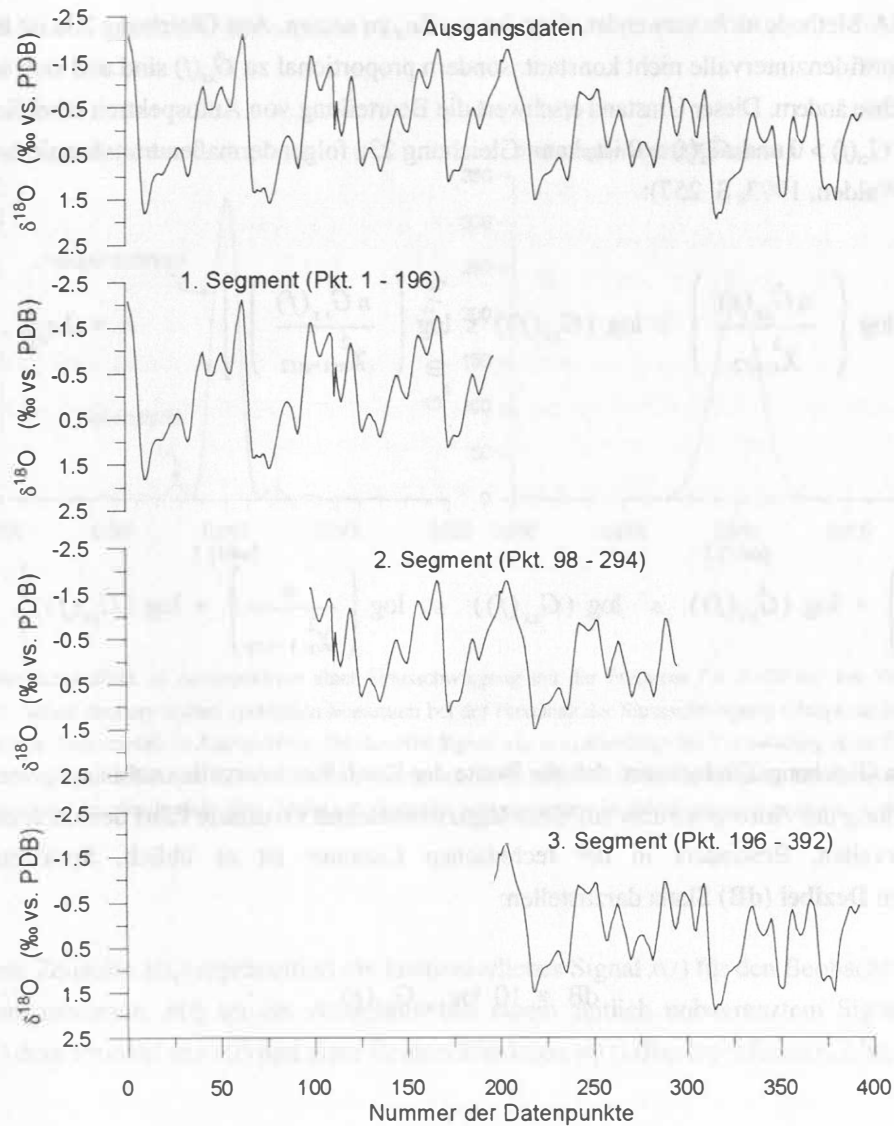


Abb. 7: Prinzip der Segmentüberlappung. Die aus 392 Punkten bestehende Ausgangszeitreihe wird in drei Segmente unterteilt, die sich um jeweils 50 % überlappen. (Bei den Ausgangsdaten handelt es sich um den SPECMAP-Stack [Imbrie et al., 1984]; nach Percival und Walden, 1993.)

Zunächst soll aber noch die Bestimmung von **Konfidenzintervallen** für das geschätzte Autospektrum beschrieben werden. Da die Komponenten eines Autospektrums als χ^2 -verteilte Zufallsvariablen aufzufassen sind (s. oben), ergibt sich als $(1-\alpha)$ Konfidenzintervall für $G_{xx}(f)$ (Bendat und Piersol, 1986, S. 286):

$$\left[\frac{n \hat{G}_{xx}(f)}{\chi^2_{n; \alpha/2}} \leq G_{xx}(f) \leq \frac{n \hat{G}_{xx}(f)}{\chi^2_{n; 1-\alpha/2}} \right] \quad n = 2n_{eff}. \quad (23a)$$

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Wird die WOSA-Methode *nicht* verwendet, dann ist $n = 2n_d$ zu setzen. Aus Gleichung 23a ist leicht ersichtlich, daß die Konfidenzintervalle nicht konstant, sondern proportional zu $\hat{G}_{xx}(f)$ sind und sich somit entlang der Frequenzachse ändern. Dieser Umstand erschwert die Beurteilung von Autospektren erheblich. Unter der Annahme, daß $G_{xx}(f) > 0$ und $\hat{G}_{xx}(f) > 0$ ist, kann Gleichung 23a folgendermaßen transformiert werden (z.B. Percival und Walden, 1993, S. 257):

$$\left[\log \left(\frac{n \hat{G}_{xx}(f)}{\chi^2_{n;\alpha/2}} \right) \leq \log (G_{xx}(f)) \leq \log \left(\frac{n \hat{G}_{xx}(f)}{\chi^2_{n;1-\alpha/2}} \right) \right] \quad n = 2n_{eff},$$

und weiterhin

$$\left[\log \left(\frac{n}{\chi^2_{n;\alpha/2}} \right) + \log (\hat{G}_{xx}(f)) \leq \log (G_{xx}(f)) \leq \log \left(\frac{n}{\chi^2_{n;1-\alpha/2}} \right) + \log (\hat{G}_{xx}(f)) \right]. \quad (23b)$$

Das Ergebnis in Gleichung 23b bedeutet, daß die Breite der Konfidenzintervalle unabhängig von $\log (\hat{G}_{xx}(f))$ ist. Die Darstellung des Autospektrums auf einer **logarithmischen Ordinate** führt demnach zu konstanten Konfidenzintervallen. Besonders in der technischen Literatur ist es üblich, Spektren auf einer logarithmischen **Dezibel (dB)** Skala darzustellen:

$$\text{dB} \equiv 10 \log_{10} G_{xx}(f) .$$

3.2.1 Spektraler Leckeffekt, Fensterfunktionen und Bandbreite

Zur Veranschaulichung soll das Autospektrum für einen Prozeß bestimmt werden, der aus *einer* Sinusschwingung besteht. Die Zeitreihe $x(t_k)$ besteht aus 200 äquidistanten Beobachtungen dieses Prozesses ($\Delta t = 5 \text{ ka}$). In Abbildung 8a ist das geschätzte Autospektrum für $n_{50} = 2$ überlappende Segmente gezeigt. Anstelle eines Linienspektrums mit einem einzigen Amplitudenmaximum bei der Frequenz der Sinusschwingung ($f_s = 0.01 \text{ ka}^{-1}$; vergl. Abb. 4a), tauchen weitere sog. **Nebenzipfel** zu beiden Seiten des **Hauptmaximums** auf. Weiterhin kann beobachtet werden, daß das Hauptmaximum nicht der erwarteten Linie entspricht, sondern eine gewisse Breite einnimmt. Obwohl die Varianz des Prozesses nur durch die Sinusschwingung mit konstanter Frequenz bestimmt wird, legt das Autospektrum den Schluß nahe, daß ein Teil der Varianz im Zusammenhang mit Frequenzen unter- und oberhalb von f_s steht. Dieses Phänomen, das als spektraler Leckeffekt ('spectral leakage') bezeichnet wird, stellt einen erheblichen Störfaktor bei der Spektralanalyse dar und soll daher etwas genauer beleuchtet werden.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

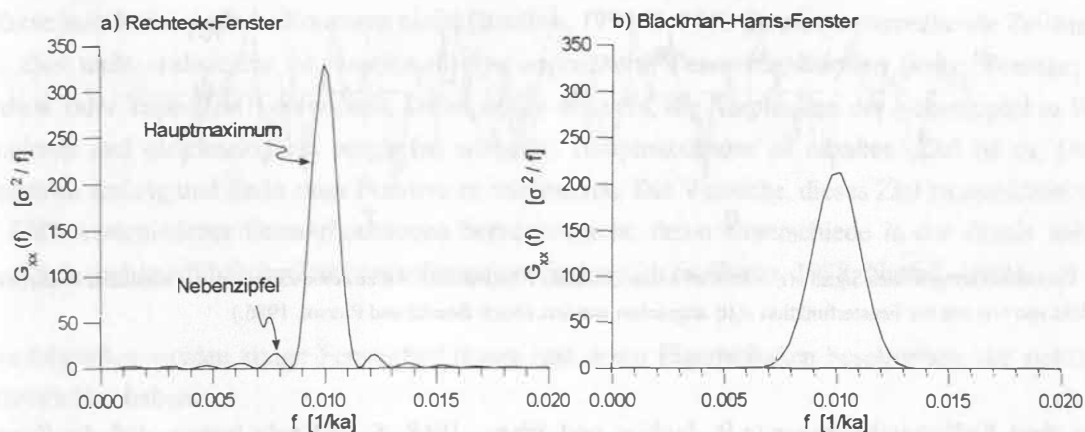


Abb. 8: Spektraler Leckeffekt. a) Autorspektrum einer Sinusschwingung mit der Frequenz $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ bei Verwendung eines Rechteckfensters. Neben dem erwarteten spektralen Maximum bei der Frequenz der Sinusschwingung (Hauptmaximum) erscheinen weitere lokale Maxima (Nebenzipfel). b) Autorspektrum für dasselbe Signal wie in a) allerdings bei Verwendung eines Blackman-Harris-Fensters. Die Verwendung des Fensters führt zur Unterdrückung der Nebenzipfel. Gleichzeitig steigt die Breite des Hauptmaximums deutlich an, während die Amplitude sinkt. Die Fläche unterhalb der Autorspektrums ist jedoch genauso groß wie in a).

Eine diskrete Zeitreihe $x(t_k)$ repräsentiert ein kontinuierliches Signal $x(t)$ für den Beobachtungszeitraum T . Es wird angenommen, $x(t)$ sei ein Ausschnitt aus einem zeitlich unbegrenztem Signal $v(t)$. Dann entspricht $x(t)$ dem Produkt aus $v(t)$ und einer Rechteckfunktion $w_r(t)$ (Rechteckfenster; Abb. 9 und 10):

$$x(t) = w_r(t) v(t), \quad (24)$$

mit

$$w_r(t) = \begin{cases} 1 & 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (25)$$

Die zur Schätzung des Autorspektrums notwendige Fourier-Transformation von $x(t)$ ist also äquivalent zur Transformation des Produktes aus $v(t)$ und $w_r(t)$.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

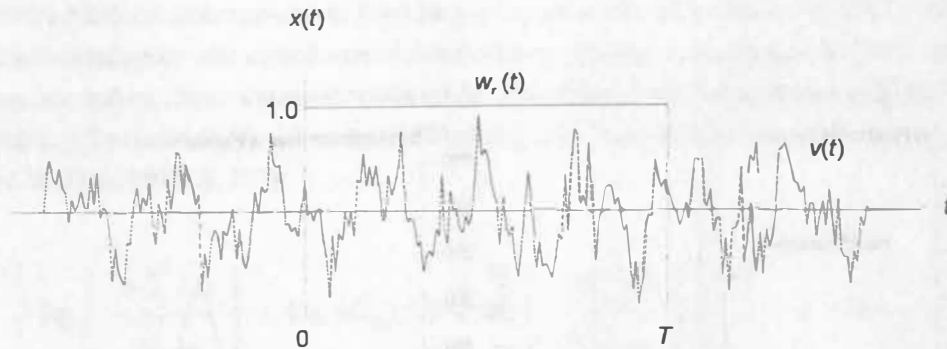


Abb. 9: Ein zeitlich unbegrenztes Signal $v(t)$ wird über einen Zeitraum T beobachtet, woraus eine Zeitreihe $x(t)$ resultiert. Letztere kann als Produkt von $v(t)$ mit der Fensterfunktion $w_r(t)$ angesehen werden. (Nach Bendat und Piersol, 1986.)

Aus dem **Faltungstheorems** (z.B. Jenkins und Watts, 1968, S. 56) geht hervor, daß die Fourier-Transformation des Produktes zweier Funktionen im Zeitbereich der Faltung der transformierten Funktionen im Frequenzbereich entspricht:

$$w(t) v(t) \rightarrow W(f) * V(f) ,$$

mit

$$W(f) * V(f) = \int_{-\infty}^{\infty} W(\tau) V(f-\tau) d\tau ,$$

wobei ' \rightarrow ' ein Transformationspaar markiert und '*' einen Faltungsoperator darstellt (die Faltung stellt eine Art Übertragungsfunktion im Frequenzbereich dar [vergl. Lücke, 1992, S. 7f]). Um das Autospektrum möglichst genau zu schätzen, müßte $V(f)$ bestimmt werden. Tatsächlich wird aufgrund der endlichen Länge von $x(t)$ aber die Größe $X(f) = W_r(f) * V(f)$ bestimmt. Die Fourier-Transformierte des Rechteckfensters (Gl. 25) ist (Bendat und Piersol, 1986, S. 394):

$$W_r(f) = T \left(\frac{\sin \pi f T}{\pi f T} \right) e^{-i\pi f T} . \quad (26)$$

Der Betrag von $W_r(f)$ ist in Abbildung 11 dargestellt. Die Funktion zeigt neben einem zentralen Hauptmaximum mehrere Nebenzipfel, deren Amplituden mit zunehmendem Abstand vom Hauptmaximum nur langsam abnehmen. Ursache dafür ist die *Diskontinuität* des Rechteckfensters, d.h. der steile Anstieg und Abfall der Fensterfunktion an beiden Enden. Die Faltung von $V(f)$ mit dieser Funktion bewirkt das im obigen Beispiel beobachtete Lecken. Spektrale Informationen, d.h. die spektrale Verteilung der Varianz von $x(t)$, kann also vom Hauptmaximum in Frequenzbereiche, die deutlich daneben liegen, verschoben werden ('lecken') und somit eine fehlerhafte Schätzung des Autospektrums hervorrufen.

Um eine fehlerfreie Schätzung des Autospektrums zu erhalten, müßte die Fourier-Transformierte der Fensterfunktion, $W_d(f)$, eine sog. Delta-Funktion sein (Hess, 1991, S. 20; eine Delta-Funktion stellt einen Impuls dar, dessen Breite gegen Null und dessen Amplitude gegen unendlich strebt, wobei die Fläche unter der Kurve jedoch eine endliche Konstante bleibt [Buttkus, 1991, S. 41]). Da eine entsprechende Zeitfunktion $w_d(t)$ aber nicht realisierbar ist, wurden diverse angenäherte **Fensterfunktionen** (kurz: **Fenster**; engl. 'window' oder 'taper') $w(t)$ entwickelt. Dabei wurde versucht, die Amplituden der Nebenzipfel in $V(f)$ zu minimieren und gleichzeitig ein möglichst schmales Hauptmaximum zu erhalten. Ziel ist es, Diskontinuitäten an Anfang und Ende eines Fensters zu minimieren. Die Versuche, dieses Ziel zu erreichen, haben eine Fülle verschiedener Fensterfunktionen hervorgebracht, deren Unterschiede in der Praxis teilweise unmerklich sind (ausführliche Zusammenfassungen finden sich in: Harris, 1978; Nuttall, 1981).

Im folgenden werden einige Fensterfunktionen und deren Eigenschaften beschrieben, die sich in der Praxis bewährt haben:

1. Dreieck- oder Parzen-Fenster

$$w_p(t) = \begin{cases} 1 - \left| \frac{t - \frac{T}{2}}{\frac{T}{2}} \right| & 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (27a)$$

2. Welch-Fenster

$$w_w(t) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{t - \frac{T}{2}}{\frac{T}{2}} \right)^2 & 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (27b)$$

3. Hanning- oder \cos^2 -Fenster

$$w_h(t) = \begin{cases} 1 - \cos^2 \left(\frac{2\pi t}{T} \right) & 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (27c)$$

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

4. Blackmann-Harris-Fenster mit drei Koeffizienten

$$w_b(t) = \begin{cases} a_0 - a_1 \cos \frac{2\pi t}{T} + a_2 \cos \frac{4\pi t}{T} & 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (27d)$$

mit $a_0 = 0.4243801$, $a_1 = 0.4973406$ und $a_2 = 0.0782793$ (Nuttall, 1981).

Diese Fensterfunktionen sind zusammen mit dem Rechteckfenster in Abbildung 10 dargestellt. Abbildung 11 zeigt die normalisierten Beträge der entsprechenden Fourier-Transformierten der Fenster.

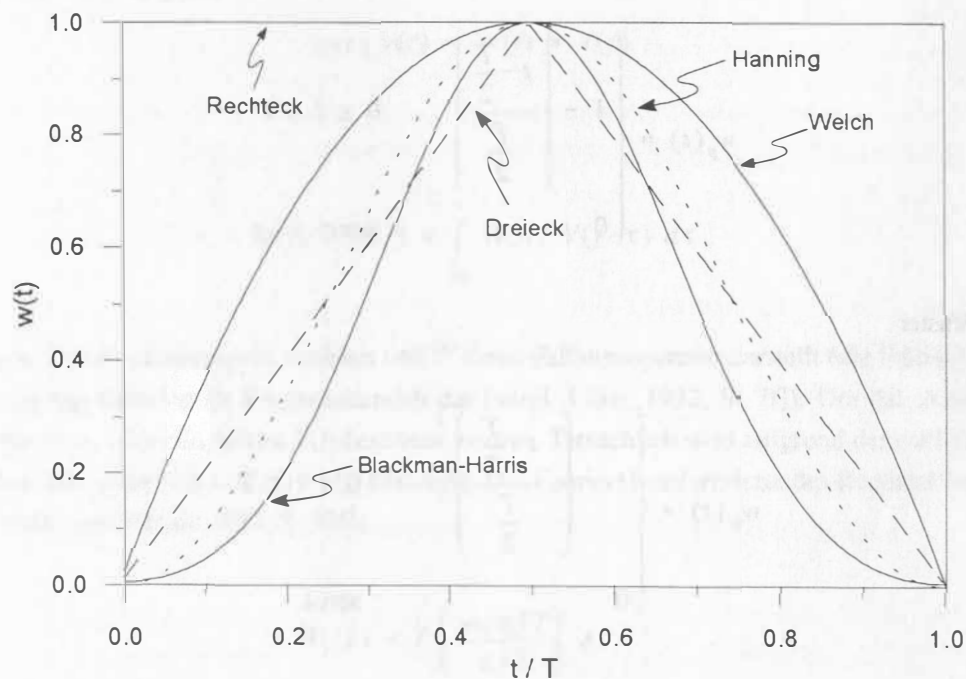


Abb. 10: Normalisierter Verlauf der verschiedenen Fensterfunktionen.

Die **Anwendung der Fenster** geschieht dadurch, daß jedes der n_d bzw. n_{s0} Segmente, aus denen nach Gleichung 18 das Autospektrum geschätzt werden soll, *vor* der Fourier-Transformation (Gl. 11) mit einer der Fensterfunktionen (Gl. 27a-d) multipliziert wird (wird kein Fenster gewählt, dann entspricht dieses dem Rechteckfenster). Der Effekt aller Fenster besteht darin, die zu transformierende Datensequenz an ihren

Enden *kontinuierlich* gegen Null gehen zu lassen. Damit die in Gleichungen 11 und 15 durchgeführten Skalierungen ihre Gültigkeit behalten, wird

$$\sum_{k=0}^{N-1} w(t_k)^2 = 1 \quad (28)$$

gewählt, was genau dem Rechteckfenster entspricht (Percival und Walden, 1993, S. 208). Die Größe $w(t_k)^2$ in Gleichung 28 repräsentiert eine der Fensterfunktionen aus Gleichungen 25 bzw. 27a bis 27d in diskreter Form.

Aus Abbildung 11 wird deutlich, daß der Einsatz von Fenstern zu einer Abschwächung der Nebenzipfel geführt hat. Es ist allerdings auch erkennbar, daß die Hauptmaxima im Vergleich zum Rechteckfenster merklich breiter geworden sind. Die Breite des Hauptmaximums der verschiedenen Fenster bewirkt, daß ein Frequenzbereich $f_n \pm \delta f$ die Spektralschätzung $\hat{G}_{xx}(f_n)$ beeinflusst. Dieser Effekt führt dazu, daß Details von $G_{xx}(f)$ im Intervall $[-\delta f, \delta f]$ nicht aufgelöst werden können (dieses ist analog zum systematischen Fehler, der in Abschnitt 3.2 diskutiert wurde). Ein übliches Maß für das Intervall $[-\delta f, \delta f]$ bildet die sog. **3 dB-Bandbreite** b_w eines Fensters. Darunter versteht man die Gesamtbreite des Hauptmaximums von $W(f)$ an der Stelle, wo $W(f)$ beiderseits des Maximalwertes gerade den Wert -3 dB erreicht (vergl. Abb. 11). Auf einer linearen Skala entspricht dieses der halben Amplitude des Maximalwertes.

Der Frequenzabstand der am engsten beieinander liegenden Strukturen von $G_{xx}(f)$, die bei der Spektralanalyse von Interesse sind, wird als **spektrale Bandbreite** B_s bezeichnet. Mit dem dazugehörigen Frequenzintervall $[f_1, f_2]$ ergibt sich $B_s = |f_2 - f_1|$. Um nun Strukturen von $G_{xx}(f)$ im Intervall B_s aufzulösen, muß zumindest $b_w \leq B_s$ gelten. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Amplituden des Autospektrums bei beiden Frequenzen gleich groß ist: $G_{xx}(f_1) = G_{xx}(f_2)$. Diese Wahl der Bandbreite erlaubt allerdings noch keine optimale **spektrale Auflösung** zweier benachbarter Scheitelwerte (Abb. 12). In der Praxis sollte daher eine höhere Auflösung gewählt werden. Üblicherweise wird hierzu die **6 dB-Bandbreite** B_w verwendet:

$$B_w = \beta_w \cdot \Delta f, \quad (29)$$

worin β_w die normalisierte ($\Delta f = 1$) Breite des Hauptmaximums dort angibt, wo die Flanken von $W(f)$ auf den Wert -6 dB abgefallen sind (vergl. Abb. 11). Diese und andere wichtige Kenngrößen der beschriebenen Fenster sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Wird die Auflösung bei einer Spektralanalyse so gewählt, daß $B_s = B_w$ ist, dann ist sichergestellt, daß zwei Maxima eines Spektrums mit dem Abstand B_s nicht nur voneinander unterschieden werden können, sondern daß ihre Form auch annähernd richtig bestimmt wird (Harris, 1978; Abb. 12).

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

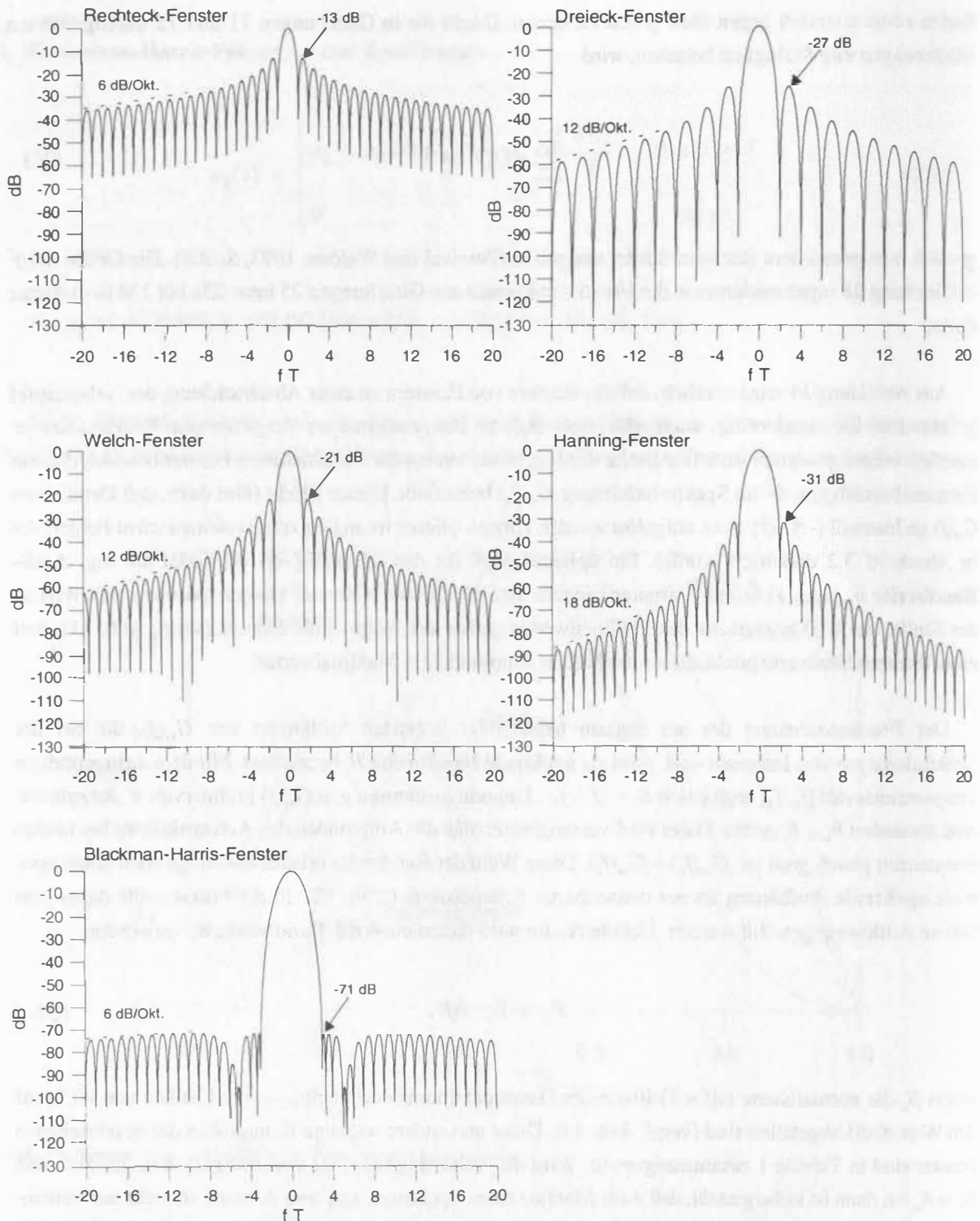


Abb. 11: Autospektren der in Abbildung 10 gezeigten Fensterfunktionen. Die Darstellung erfolgt auf einer normierten, logarithmischen Dezibel-Skala gemäß $\text{dB} \equiv 10 \log_{10} |W(f)/W(0)|^2$, wobei $W(f)$ die Fourier-Transformierten der Fensterfunktionen $w(t)$ sind. Die Zahlen an den Kurven markieren die maximale Nebenzipfelamplitude bzw. den durchschnittlichen Abfall der Nebenzipfelamplituden pro Oktave.

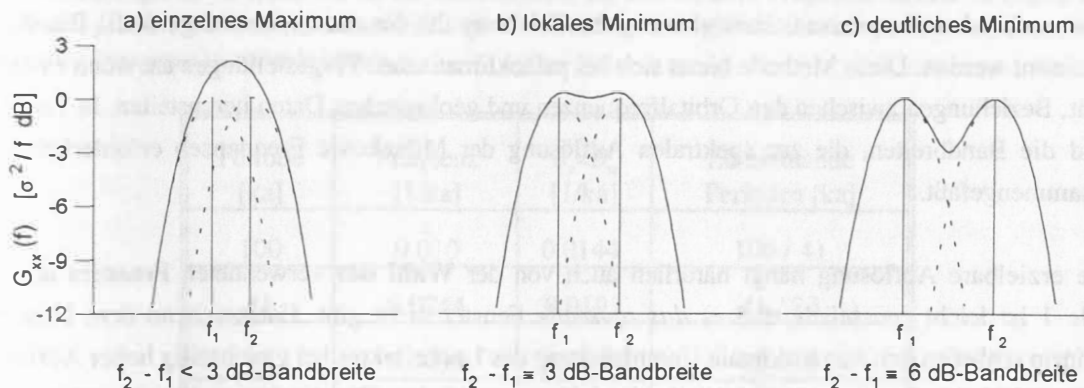


Abb. 12: Zustandekommen der Bandbreite bei der Spektralanalyse. Die diskreten Fourier-Transformierten sind die gewichtete (Fensterfunktionen) Summe spektraler Komponenten des Ausgangssignals bei den entsprechenden diskreten Fourier-Frequenzen. Dargestellt sind zwei Signale gleicher Amplitude bei den Fourier-Frequenzen f_1 und f_2 und die durch jedes Signal hervorgerufenen Maxima im Spektrum (gestrichelte Linien). Das geschätzte Spektrum ergibt sich aus der Summe der zwei Maxima. Der Abstand der Signale entlang der Frequenzachse wird als spektrale Bandbreite B_s bezeichnet. a) B_s ist so gewählt, daß sich die Flanken der Maxima bei einer normalisierten Amplitude von -1 dB überschneiden. Die Signalkomponenten bei den Frequenzen f_1 und f_2 erscheinen dann als ein Maximum im Spektrum (durchgezogene Linie). b) Eine Vergrößerung von B_s führt dazu, daß sich die Flanken der beiden Maxima bei -3 dB überschneiden. Die Resultierende zeigt ein lokales Minimum, daß jedoch nicht ausgeprägt genug ist, um beide Signale voneinander zu unterscheiden. c) Erst wenn B_s so groß ist, daß sich die Flanken bei -6 dB überschneiden, weist die Summe der Einzelmaksima ein ausgeprägtes Minimum auf, daß die Unterscheidung der beiden Signalkomponenten eindeutig ermöglicht. (Nach Harris, 1978.)

Ein Problem ergibt sich allerdings dadurch, daß die Form von $G_{xx}(f)$ in der Regel nicht bekannt ist (das würde die Spektralanalyse ja überflüssig machen!) und somit keine genauen Informationen über B_s vorliegen. Um möglichst viele Details zu erkennen, könnte man für B_w den kleinstmöglichen Wert wählen. Davon ist allerdings abzuraten, da dadurch ein großer relativer Standardfehler bei der Schätzung des Autospektrums hervorgerufen wird (Gl. 20 und 29). Zwei Lösungsansätze bieten sich zur Wahl von B_s und damit B_w an:

- I. Es werden mehrere Spektralanalysen mit derselben Zeitreihe durchgeführt, wobei die 6 dB-Bandbreite jeweils verkleinert wird. Größere Bandbreiten werden einen relativ glatten Verlauf von $\hat{G}_{xx}(f)$ zur Folge haben, während kleinere Bandbreiten eine zunehmende Anzahl von Details in $\hat{G}_{xx}(f)$ sichtbar werden lassen. Schließlich wird ein Punkt erreicht, an dem das geschätzte Autospektrum eher unregelmäßig und sprunghaft aussieht und dem ungeglätteten Periodogramm ähnelt. Ziel des Verfahrens ist es nun, aus der Beobachtung der Veränderung von $\hat{G}_{xx}(f)$ als Funktion von B_w , diejenige Funktion $\hat{G}_{xx}(f)$ auszuwählen, die nicht zu glatt aber auch nicht zu unregelmäßig *erscheint*. Für diese abschließende Wahl gibt es - außer Erfahrungswerten - keine allgemein gültigen Kriterien. In der englischsprachigen Literatur wird diese Methode als 'window closing' bezeichnet (Jenkins und Watts, 1968, S. 280f).

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

2. Oftmals ist es lediglich von Interesse festzustellen, ob die Varianz einer Zeitreihe mit bestimmten Frequenzen, die bekannt sind, verknüpft ist. Aus dem kleinsten Abstand einer Gruppe von zu untersuchenden Frequenzen, kann dann nach Gleichung 29 die dazu notwendige 6 dB-Bandbreite bestimmt werden. Diese Methode bietet sich bei paläoklimatischen Fragestellungen an, wenn es darum geht, Beziehungen zwischen den Orbitalfrequenzen und geologischen Daten herzustellen. In Tabelle 2 sind die Bandbreiten, die zur spektralen Auflösung der Milanković Frequenzen erforderlich sind, zusammengefaßt.

Die erzielbare Auflösung hängt natürlich auch von der **Wahl des** verwendeten **Fensters** ab. Aus Tabelle 1 ist leicht ersichtlich, daß es *das optimale* Fenster nicht gibt. Entsprechend dem Unsicherheitsprinzip schließen sich eine maximale Unterdrückung des Leckeffektes bei gleichzeitig hoher Auflösung aus. Die Wahl des Fensters stellt folglich einen Kompromiß dar. Für Analysen, die eine relativ hohe Auflösung erforderlich machen, sollte das Welch-Fenster verwendet werden, da dieses (mit Ausnahme des nicht empfehlenswerten Rechteckfensters, s.o.) den kleinsten Wert für β_w aufweist. Zur Kontrolle ist es allerdings sehr sinnvoll, die Spektralanalyse mit einem anderen Fenster zu wiederholen. Dabei sollte dann ein Fenster mit einem geringen Leckeffekt und geringer Korrelation der überlappenden Segmente benutzt werden, um einen möglichst geringen relativen Standardfehler zu erzielen.

Tab. 1: Kenngrößen der in Abbildung 10, 11 dargestellten Fensterfunktionen (Harris, 1978; Nuttall, 1981). Die maximale Nebenzipfelamplitude und der Abfall der Nebenzipfel-Amplituden bilden ein Maß für die Unterdrückung des Leckeffektes (eine Oktave entspricht einer Verdoppelung der Frequenz). Die normalisierte 6 dB-Bandbreite ist ein Maß für die Breite eines Hauptzipfels (s. Gl. 29). Die bei der Verwendung der WOSA-Methode auftretenden Korrelationen zwischen den überlappenden Segmenten spiegelt sich in dem Parameter c_{50} wider (s. Gl. 22). Die besten Werte für jeden Parameter sind fett dargestellt. (NB: die von Harris (1978) angegebene Werte für das Blackman-Harris-Fenster sind zum Teil falsch [s. Nuttall, 1981]).

Fenstertyp	Max. Nebenzipfelamplitude [dB]	Max. Abfall d. Nebenzipfelamplituden [dB/Oktave]	Normalisierte 6 dB-Bandbreite, β_w	Korrelation bei Überlappung, c_{50}
Rechteck	-13	6	1.21	0.500
Dreieck	-27	12	1.78	0.250
Welch	-21	12	1.59	0.344
Hanning	-31	18	2.00	0.167
Blackmann-Harris	-71	6	2.26	0.096

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Tab. 2: Anforderungen an die Bandbreite bei der Spektralanalyse, um die Milanković-Frequenzen auflösen zu können. Bei der Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen sollte die 6 dB-Bandbreite folglich möglichst kleiner als 0.009 ka^{-1} sein, um den Bereich der Milanković-Frequenzen beurteilen zu können.

Periode [ka]	Frequenz [1/ka]	$B_s=B_w$ [1/ka]	Zu trennende Perioden [ka]
100	0.010	0.0144	100 / 41
41	0.0244	0.0191	41 / 23
23	0.0435	0.0091	23 / 19
19	0.0526	-	-

Abschließend soll das gerechnete Beispiel aus Abschnitt 3.2 im Zusammenhang mit den Fensterfunktionen noch einmal aufgegriffen werden. Anstatt des Rechteckfensters soll nun ein Blackman-Harris-Fenster verwendet werden. Zur Vergleichbarkeit der Resultate wird anstelle von Δf jetzt die 6 dB-Bandbreite herangezogen. Für das Rechteckfenster war $\Delta f_r = 1/50$; damit ergibt für die 6 dB-Bandbreite des Rechteckfensters: $B_w = 1.21$ und somit $\Delta f = 0.0242$ (Gl. 29). Damit ist die fundamentale Frequenz bei Anwendung eines Blackman-Harris-Fensters $\Delta f_b = B_w / 2.26 = 0.011$, weiterhin ist $L = 75$ (Gl. 13) und somit $n_{50} \approx 4$ (Gl. 21). Wegen der geringen Korrelation der überlappenden Segmente ($c_{50} = 0.096$ entsprechend 9.6 %; s. Tab. 1) ist $n_{eff} = 3.95$ und damit $\epsilon_r \approx 0.5$. Dieses Ergebnis mag zunächst überraschen, da es scheinbar keine Verbesserung gegenüber der Verwendung des Rechteckfensters signalisiert. Der Unterschied besteht darin, daß bei Verwendung des Blackman-Harris-Fensters eine sehr *effektive* Unterdrückung des Leckeffektes erreicht wurde, was sich in den berechneten Parametern allerdings nicht niederschlägt. Wird anstelle der 6 dB-Bandbreite die Anzahl der Segmente als Referenz für einen Vergleich herangezogen, dann kommt man zu folgendem Ergebnis: Die Anzahl der Segmente war $n_{50} = 7$ für das Rechteckfenster (s. Abschn. 3.2). Mit diesem Wert ergibt sich $n_{eff} = 6.9$ für das Blackman-Harris-Fenster und somit $\epsilon_r = 0.38$. Der Preis für diesen deutlich verkleinerten relativen Standardfehler wurde jedoch mit einer geringeren Auflösung erkaufte. Da L konstant blieb, ist $\Delta f = 1/50$ ebenfalls konstant geblieben. Damit ist die 6 dB-Bandbreite um das $2.26/1.21 \approx 1.9$ -fache gestiegen, bei gleichzeitig stark abgeschwächtem Leckeffekt.

Diese Beispiele verdeutlichen noch einmal das Unsicherheitsprinzip, wonach sich der relative Standardfehler der Schätzung und die 6 dB-Bandbreite nicht gleichzeitig minimieren lassen. Bedenkt man, daß der Ausgangspunkt der Betrachtung ein Periodogramm mit relativen Standardfehlern von 100% und erheblichen Leckeffekten war, dann bedeuten die beschriebenen Methoden zur Verbesserung der Schätzung eines Autospektrums allerdings schon einen erheblichen Fortschritt.

3.2.2 'Aliasing'-Effekte

Bei der Einführung des Abtasttheorems in Abschnitt 2.1 wurde stillschweigend vorausgesetzt, daß das abgetastete Signal keine Varianzanteile oberhalb der Nyquist-Frequenz enthielt. Was passiert nun aber, wenn die Abtastfrequenz so gewählt wird, daß sich ein Teil der Signalvarianz im Frequenzbereich oberhalb der Nyquist-Frequenz befindet? Abbildung 13 zeigt ein Signal, das aus einer Sinusschwingung mit der Frequenz f_1 besteht. Ebenfalls dargestellt sind äquidistante Probenpunkte, deren Abstand so gewählt ist, daß die entsprechende Nyquist-Frequenz kleiner als f_1 ist. Der Verlauf der durch die Abtastung entstandene Zeitreihe ist in Abbildung 13 durch die gestrichelte Linie markiert. Es ist deutlich erkennbar, daß die durch die Zeitreihe repräsentierte Frequenz, f_2 , *niedriger* als die abgetastete Frequenz ist. Eine Autospektralanalyse der Zeitreihe würde also anstelle des tatsächlichen Maximums bei f_1 einen Höchstwert bei der niedrigeren Frequenz f_2 zeigen. Diese Verschiebung von höherfrequenten Varianzanteilen in niedrigere Frequenzbereiche wird als 'Aliasing' bezeichnet. In Abbildung 14 ist die Wirkung dieses Effektes auf ein geschätztes Autospektrum dargestellt.

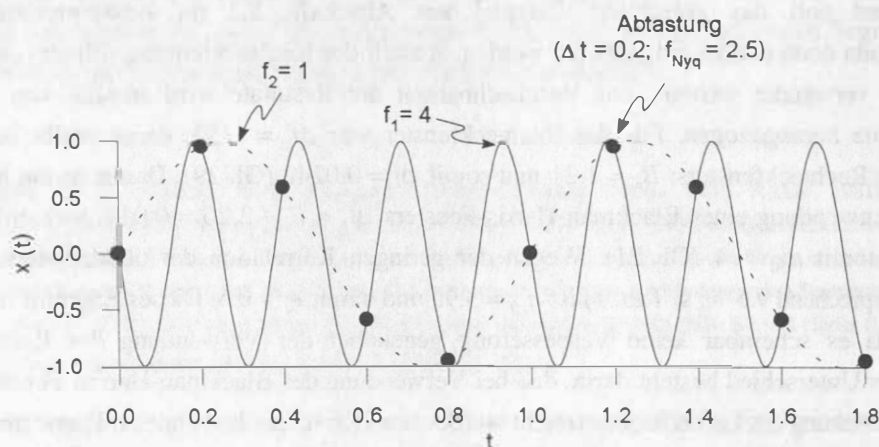


Abb. 13: Zustandekommen des 'Aliasing'-Effektes. Der Funktionswert eines kontinuierlichen Signals mit der Frequenz $f_1 = 4$ (durchgezogene Linie; Einheiten werden absichtlich nicht mit dargestellt) wird in einem Abstand von $\Delta t = 0.2$ beobachtet (Punkte). Die resultierende Nyquist-Frequenz ($f_{Nyq} = 2.5$) ist somit niedriger als die Signalfrequenz. Die diskrete Zeitreihe (gestrichelte Linie) besitzt eine niedrigere Frequenz ($f_2 = 1$) als das Ausgangssignal.

Zur Vermeidung des 'Aliasing'-Effektes muß sichergestellt sein, daß die gemessene Zeitreihe keine Varianzanteile in Frequenzbereichen oberhalb der Nyquist-Frequenz enthält. In technischen Anwendungen wird dieses durch ein sog. Tiefpassfilter gewährleistet, das *vor* der eigentlichen Beprobung alle Signalanteile oberhalb der Nyquist-Frequenz unterdrückt. Diese Art der Filterung ist bei der Beprobung von marinen Tiefseekernen allerdings nicht realisierbar, da ein Sedimentkern eine kontinuierliche Aufzeichnung einer Variablen darstellt, in der theoretisch alle im Signal vorkommenden Frequenzen dokumentiert sind. Die Beprobung eines Sedimentkernes in bestimmten Abständen könnte also zum Auftreten eines 'Aliasing'-Effektes führen.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Den Ausweg aus diesem Problem liefert die Natur selbst und zwar in Form von **Bioturbation**. Die Durchmischung von Sedimenten führt zu einer wirksamen Unterdrückung relativ hochfrequenter Signalkomponenten im Sediment (z.B. Pestiaux und Berger, 1984; Dalfes et al., 1984) und entspricht in der Wirkung etwa einem Tiefpassfilter. Werden Sedimentkerne im Bereich der Bioturbationstiefe beprobt, dann kann davon ausgegangen werden, daß die höchsten vorkommenden Frequenzen miterfaßt werden und der 'Aliasing'-Effekt somit umgangen wird. Da entsprechende Beprobungsabstände heute üblich sind, kann der 'Aliasing'-Effekt bei der Analyse paläoklimatischer Zeitreihen weitgehend vernachlässigt werden.

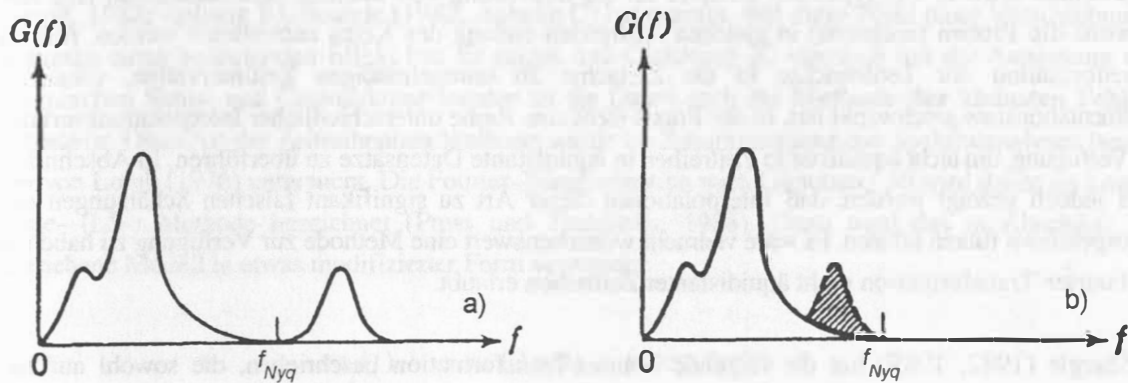


Abb. 14: 'Aliasing'-Effekt bei der Spektralanalyse. a) Wahres Autopspektrum mit Spektralanteilen oberhalb der Nyquist-Frequenz (f_{Nyq}). b) Der 'Aliasing'-Effekt bewirkt, daß die Teile des Autopspektrums, die sich oberhalb der Nyquist-Frequenz befinden, in den Bereich unterhalb der Nyquist-Frequenz gefaltet werden (aus: Bendat und Piersol, 1986).

Aus Abbildung 13 ist erkennbar, daß der 'Aliasing'-Effekt aufgrund der äquidistanten Beprobung der Sinusschwingung entsteht. Eine nicht äquidistante Beprobung hätte dieses weitgehend verhindert und ist somit eine weitere wirksame Maßnahme zur Vermeidung von 'Aliasing'-Effekten (Scargle, 1982). Ein entsprechendes Verfahren zur Spektralanalyse nicht äquidistanter Daten wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

3.3 Lomb-Scargle- (LS-) Methode: Fourier-Transformation nicht äquidistanter Daten

Der wesentliche Nachteil der bisher beschriebenen Methode zur Schätzung des Autospektrums ist, daß die Daten äquidistant sein müssen. Dieses liegt an der Art der Formulierung der diskreten Fourier-Transformation in Gleichung 11. Da paläoklimatische Datensätze in der Regel nicht äquidistant sind, können die bisher beschriebenen Methoden zur Autospektralschätzung nicht direkt auf solche Daten angewendet werden. Als typisches Beispiel sei die Beprobung von marinen Sedimentkernen angeführt: Obwohl die Proben (meistens) in gleichen Abständen entlang des Kerns entnommen werden, führt die Transformation der Teufenachse in die Zeitachse zu unregelmäßigen Zeitintervallen, sobald die Sedimentationsrate geschwankt hat. In der Praxis steht eine Reihe unterschiedlicher Interpolationsverfahren zur Verfügung, um nicht äquidistante Zeitreihen in äquidistante Datensätze zu überführen. In Abschnitt 6.1 wird jedoch gezeigt werden, daß Interpolationen dieser Art zu signifikant falschen Schätzungen eines Autospektrums führen können. Es wäre vielmehr wünschenswert eine Methode zur Verfügung zu haben, die die Fourier-Transformation nicht äquidistanter Zeitreihen erlaubt.

Scargle (1982, 1989) hat die folgende Fourier-Transformation beschrieben, die sowohl auf nicht äquidistante als auch äquidistante Zeitreihen anwendbar ist. Gegeben sei eine mittelwertfreie, stationäre Zeitreihe, $x(t)$, für die folgende Vereinbarungen getroffen werden:

$$x_n \equiv x(t_n) , \quad n = 1, 2, \dots, N , \quad \omega_k \equiv 2\pi f_k > 0 .$$

Dann gilt für die Fourier-Transformation:

$$X_k \equiv X(\omega_k) = F_0 \sum_n A x_n \cos(\omega_k(t_n - \tau(\omega_k))) + i B x_n \sin(\omega_k(t_n - \tau(\omega_k))) , \quad (30)$$

mit

$$F_0(\omega_k) = \left(\frac{N}{2} \right)^{1/2} e^{-i\omega_k t_f} ,$$

$$A(\omega_k) = \left[\sum_n \cos^2(\omega_k(t_n - \tau(\omega_k))) \right]^{-1/2} ,$$

$$B(\omega_k) = \left[\sum_n \sin^2(\omega_k(t_n - \tau(\omega_k))) \right]^{-1/2}$$

und

$$\tau(\omega_k) = \frac{1}{2\omega_k} \tan^{-1} \left[\frac{\sum_n \sin(2\omega_k t_n)}{\sum_n \cos(2\omega_k t_n)} \right].$$

Die Konstante τ gewährleistet, daß das Ergebnis der Fourier-Transformation an sich zeitinvariant ist, d.h. daß eine Verschiebung der Zeitachse um eine Konstante ($t_n \rightarrow t_n + T_0$) keinen Einfluß auf das Ergebnis hat (Scargle, 1982, Anhang B). Scargle (1982, Anhang C) hat gezeigt, daß diese Wahl einer Verschiebungskonstanten einen bedeutenden Effekt hat. Er zeigte, daß Gleichung 30 identisch mit der Anpassung von harmonischen Sinus- und Cosinuskomponenten an die Daten nach der **Methode der kleinsten Fehlerquadrate** ist. Diese Art der Zeitreihenbeschreibung wurde im Zusammenhang mit Spektralanalysen bereits früher von Lomb (1976) untersucht. Die Fourier-Transformation nach Gleichung 30 wird daher als Lomb-Scargle- (LS-) Methode bezeichnet (Press und Teukolsky, 1988). Dazu wird das in Abschnitt 2.1 beschriebene Modell in etwas modifizierter Form verwendet:

$$x_f(t) = a \sin(2\pi ft) + b \cos(2\pi ft). \quad (31)$$

Die LS-Methode minimiert nun die Summe der Fehlerquadrate aus der Differenz zwischen diesem Modell und den Daten, $\chi^2(f)$:

$$\chi^2(f) \equiv \sum_{i=1}^N [x(t_i) - x_f(t_i)]^2. \quad (32)$$

Da die Fourier-Transformation nach Gleichung 11 jedoch *nicht* zeitinvariant ist, sondern im Fall $t_n \rightarrow t_n + T_0$ eine Phasenverschiebung auftritt, muß dieses in Gleichung 30 berücksichtigt werden. Der Faktor $\exp(-i\omega_k t_f)$ bewirkt eine entsprechende Phasenverschiebung in Abhängigkeit vom Zeitpunkt t_f . Die Wahl dieses Zeitpunktes ist weitgehend willkürlich; Scargle (1989) bezeichnet ihn deshalb als 'fiducial origin of time'. Im Fall der univariaten Spektralanalyse hat die Festlegung dieses Zeitpunktes keinen Einfluß auf das Ergebnis der Fourier-Transformation. Der Ursprung der Zeitachse kann gleich Null gesetzt werden. Als Vorgriff sei bereits hier darauf hingewiesen, daß der Wahl des Zeitpunktes t_f bei der bivariaten Spektralanalyse eine weitaus größere Bedeutung zukommt, da hiermit eine scheinbare Verschiebung von $x(t)$ entlang der Zeitachse ermöglicht wird (s. Abschn. 5.4).

Ein wesentlicher Unterschied zwischen der Fourier-Transformation nach Gleichung 30 und der nach Gleichung 11 besteht in der Wahl der Frequenzen, an denen Fourier-Komponenten bestimmt werden. Bei der LS-Methode wäre es theoretisch möglich, eine unbegrenzte Anzahl von Frequenzen in Gleichung 31 zu untersuchen. Wegen der begrenzten Anzahl von Datenpunkten in einer gegebenen Zeitreihe ist allerdings anzunehmen, daß nur eine bestimmte Anzahl der so erzeugten Fourier-Komponenten statistisch unabhängig voneinander wären. Home und Baliunas (1986) haben (mit Hilfe von Monte-Carlo-

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Experimenten) die maximale **Anzahl unabhängiger Frequenzen** untersucht. Im Fall äquidistanter Daten ist diese Anzahl unabhängiger Frequenzen im Intervall $[-f_{Nyq}, f_{Nyq}]$ ungefähr genauso groß wie die Zahl der Datenpunkte in der Zeitreihe. Dieses entspricht genau der Zahl der unabhängigen Frequenzen bei der Standard-Fourier-Transformation nach Gleichung 11 (s. auch Press und Teukolsky, 1988). Gleiches gilt auch für den Fall relativ gleichmäßig verteilter, nicht äquidistanter Daten, wie z.B. typische Zeitreihen aus der Beprobung mariner Tiefseekerne. Lediglich im Falle starker 'Klumpungen' der Daten entlang der Zeitachse, reduziert sich die Zahl unabhängiger Frequenzen deutlich (bis zu $1/3 N$). Es ist allerdings trotzdem möglich (und auch sinnvoll), eine größere Anzahl von Frequenzen zu untersuchen. Diese Art von 'Überbeprobung' (**oversampling**) stellt eine Art Interpolation dar (Scargle, 1982, Anhang D) und führt zu einer deutlichen Verbesserung der Auflösung spektraler Details.

Die Verwendung nicht äquidistanter Daten in Verbindung mit der LS-Methode hat neben der besseren spektralen Auflösung noch einen weiteren Vorteil. Wie bereits in Abschnitt 2.1 erläutert, kann für nicht äquidistante Daten nur eine mittlere Nyquist-Frequenz angegeben werden. Abschnitte der Zeitreihe, die dichter als der Durchschnitt beprobt sind, enthalten nach dem Abtasttheorem jedoch auch Informationen über Frequenzbereiche oberhalb der mittleren Nyquist-Frequenz. Es ist daher möglich, Frequenzen oberhalb der durchschnittlichen Nyquist-Frequenz mit der LS-Methode zu untersuchen (s. Beispiel in Abschn 8.1.3). Es ist allerdings schwierig abzuschätzen, bis zu welcher maximalen Frequenz die Daten signifikante Informationen enthalten. Die durchschnittliche Nyquist-Frequenz markiert auf jeden Fall die Obergrenze eines zuverlässigen Frequenzintervalls und ist für paläoklimatische Fragestellungen in der Regel vollkommen ausreichend.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die LS-Methode genauso zur Spektralanalyse eingesetzt werden kann, wie die vorher beschriebene diskrete Fourier-Transformation (Gl. 11). Das heißt, daß die statistischen Eigenschaften des Periodogramms und die Anwendung der WOSA-Methode davon unberührt bleiben. Lediglich bei der Anwendung spektraler Fenster zur Vermeidung des Leckeffektes bedarf es einiger Modifikationen in Gleichung 30. Die durch ein Fenster durchgeführte Gewichtung der Daten muß dann im Modell nach Gleichung 31 berücksichtigt werden. Scargle (1989, Anhang D) gibt entsprechend modifizierte Gleichungen an. Die **Vorteile der LS-Methode** liegen in der direkten Anwendbarkeit auf nicht äquidistante Daten, einer erhöhten spektralen Auflösung und einem vergrößerten Frequenzintervall, das untersucht werden kann. Der einzige Nachteil der Methode besteht darin, daß es sich um einen relativ rechenaufwendigen und somit langsamen Algorithmus handelt. Für die Analyse paläoklimatischer Zeitreihen, die selten aus mehr als 1000 Datenpunkten bestehen, sind die Rechenzeiten jedoch akzeptabel. Ein entsprechender Algorithmus wurde von Scargle (1989) veröffentlicht. In Abbildung 15 sind die notwendigen Schritte zur Schätzung eines Autospektrums mit Hilfe der WOSA-Methode in Verbindung mit der Lomb-Scargle Fourier-Transformation gezeigt.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

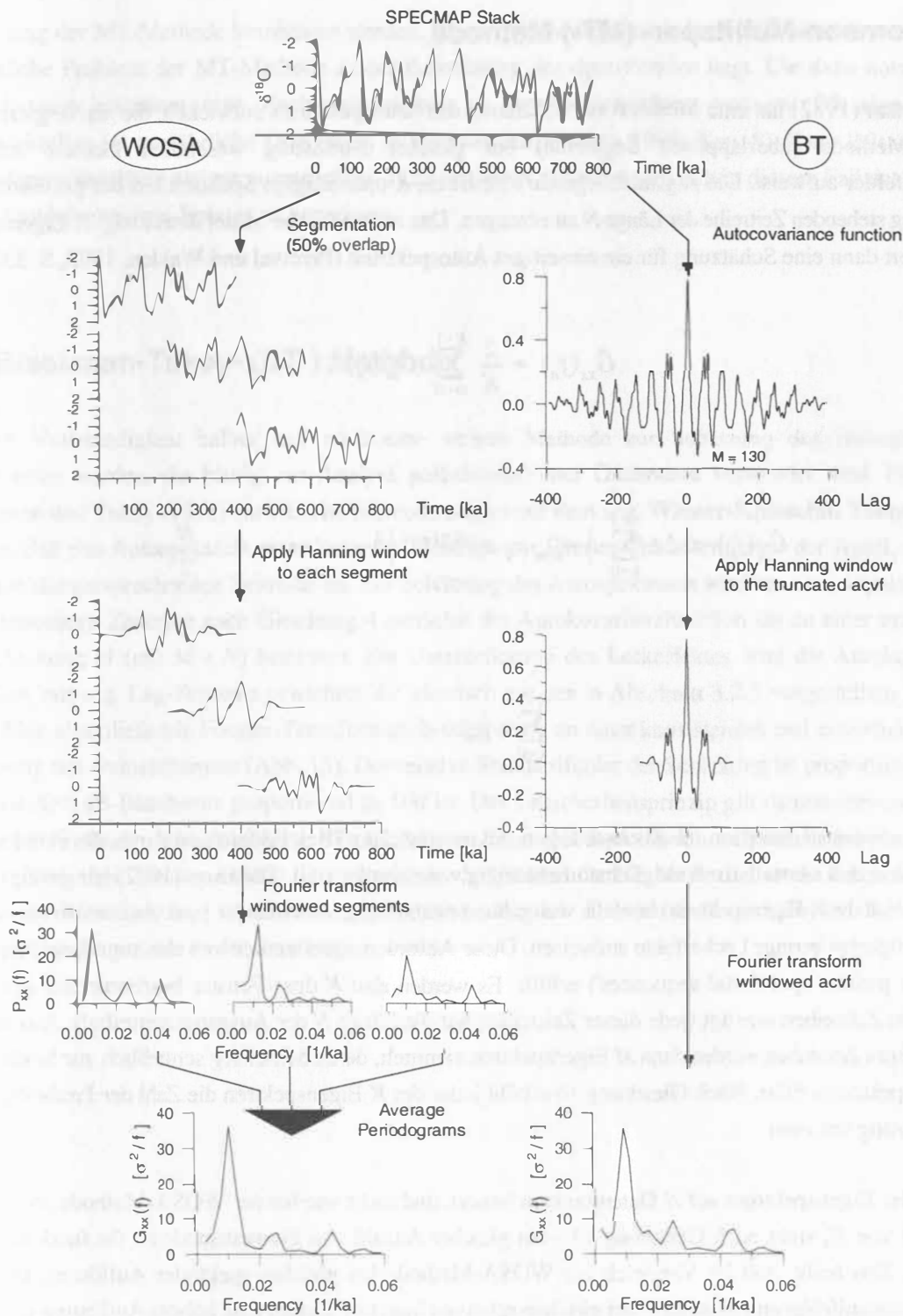


Abb. 15: Schätzung des Autospektrums des SPECMAP-Stacks mit Hilfe der ‘Welch-Overlapped-Segment-Averaging’-Methode (WOSA, links) und der Blackman-Tukey-Methode (BT, rechts; vergl. Abschn. 3.5). Beide Verfahren führen zu praktisch identischen Ergebnissen. Die WOSA-Methode erlaubt in Verbindung mit der Lomb-Scargle Fourier-Transformation die direkte Verwendung nicht äquidistanter Zeitreihen. Bei der BT-Methode werden zur Bestimmung der Autokovarianzfunktion immer äquidistante Daten benötigt. Weitere Erläuterungen im Text.

3.4 Thomson-Multitaper- (MT-) Methode

Thomson (1982) hat eine Methode zur Schätzung des Autospektrums entwickelt, die im Vergleich zur WOSA-Methode (überlappende Segmente) bei gleicher Auflösung wesentlich kleinere relative Standardfehler aufweist. Die zugrundeliegende Idee ist es, K unabhängige Spektren aus der *gesamten* zur Verfügung stehenden Zeitreihe der Länge N zu erzeugen. Das arithmetische Mittel dieser sog. **K Eigenspektren** liefert dann eine Schätzung für ein einseitiges Autospektrum (Percival und Walden, 1993, S. 333):

$$\hat{G}_{xx}(f_n) = \frac{2}{K} \sum_{m=0}^{K-1} \hat{G}_m(f_n) , \quad (33)$$

wobei

$$\hat{G}_m(f_n) \equiv \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} \left| w_{k,m} x_k e^{-i2\pi kn/N} \right|^2 \quad n = 0, \dots, \frac{N}{2} ,$$

und

$$\sum_{k=0}^{N-1} w_{k,m}^2 = 1 ,$$

worin $w_{k,m}$ die Fensterfunktion für das m -te Eigenspektrum ist. Der Trick besteht nun darin, die Fenster $w_{k,m}$ so zu wählen, daß sie statistisch möglichst unabhängig voneinander sind. Thomson (1982) hat gezeigt, daß in diesem Fall die K Eigenspektren ebenfalls weitgehend unabhängig voneinander sind. Außerdem sollen die Fenster möglichst geringe Leckeffekte aufweisen. Diese Anforderungen werden von den sog. **dpss-Fenstern** ('discrete prolate spheroidal sequences') erfüllt. Es werden also K dpss-Fenster bestimmt und damit K gewichtete Zeitreihen erzeugt (jede dieser Zeitreihen hat die Länge N der Ausgangszeitreihe!). Aus den K unabhängigen Zeitreihen werden dann M Eigenspektren ermittelt, deren Mittelung schließlich zur Schätzung des Autospektrums führt. Nach Gleichung 16 erhöht jedes der K Eigenspektren die Zahl der Freiheitsgrade der Schätzung um zwei.

Da jedes Eigenspektrum auf N Datenpunkten basiert, und nicht wie bei der WOSA-Methode auf einem Bruchteil von N , sinkt nach Gleichung 13 - bei gleicher Anzahl von Freiheitsgraden - die fundamentale Frequenz. Das heißt, daß im Vergleich zur WOSA-Methode bei gleicher spektraler Auflösung kleinere relative Standardfehler entstehen bzw. bei gleichen relativen Standardfehlern eine höhere Auflösung möglich ist.

Da die Transformation vom Zeitbereich in den Frequenzbereich in Gleichung 33 auf einer Fourier-Transformation beruht, wäre es möglich, die im vorherigen Abschnitt beschriebene Transformation für nicht äquidistante Daten anzuwenden. Damit könnte der entschiedene Vorteil der LS-Methode mit der hohen

Auflösung der MT-Methode kombiniert werden. Dieser Weg wurde hier jedoch nicht beschritten, weil das eigentliche Problem der MT-Methode in der Berechnung der dpss-Fenster liegt. Die dazu notwendigen Berechnungen erfordern eine Rechengenauigkeit in der Größenordnung von ca. 30 *signifikanten* Dezimalstellen (s. ausführliche Diskussion in Percival und Walden, 1993; Kap. 8). Zwar läßt sich diese Anforderung mit Hilfe einiger numerischer Tricks umgehen, jedoch ergibt sich in diesem Fall das Problem *nicht* äquidistante dpss-Fenster zu generieren.

3.5 Blackman-Tukey- (BT-) Methode

Der Vollständigkeit halber soll noch eine weitere Methode zur Schätzung des Autospektrums beschrieben werden, die häufig zur Analyse paläoklimatischer Datensätze verwendet wird. Diese von Blackman und Tukey (1958) entwickelte Methode basiert auf dem sog. **Wiener-Khintchin Theorem**, das besagt, daß das Autospektrum einer Zeitreihe identisch zur Fourier-Transformierten der Autokovarianzfunktion der entsprechenden Zeitreihe ist. Zur Schätzung des Autospektrums wird aus einer *äquidistanten* und stationären Zeitreihe nach Gleichung 4 zunächst die Autokovarianzfunktion bis zu einer maximalen Verschiebung M (mit $M \ll N$) bestimmt. Zur Unterdrückung des Leckeffektes wird die Autokovarianzfunktion mit sog. Lag-Fenstern gewichtet, die identisch mit den in Abschnitt 3.2.1 vorgestellten Fenstern sind. Eine abschließende Fourier-Transformation führt dann zu einer konsistenten und erwartungstreuen Schätzung des Autospektrums (Abb. 15). Der relative Standardfehler der Schätzung ist proportional zu M , während die 6 dB-Bandbreite proportional zu $1/M$ ist. Das Unsicherheitsprinzip gilt dementsprechend auch bei dieser Methode. Sehr detaillierte Beschreibungen dieser Methode finden sich bei Jenkins und Watts (1968) sowie bei Priestley (1989). Der entscheidende Nachteil der BT-Methode besteht darin, daß sie in effizienter Weise nur auf äquidistante Daten anwendbar ist. Dies schließt eine direkte Verwendung geologischer Datensätze in der Regel aus.

3. Spektralanalyse univariater stationärer Prozesse

Die Spektralanalyse ist eine Methode zur Analyse von Zeitreihen, die stationär sind. Sie ermöglicht es, die Frequenzkomponenten einer Zeitreihe zu identifizieren und zu quantifizieren. Die Methode basiert auf der Fourier-Transformation, die eine Zeitreihe in ihre Frequenzkomponenten zerlegt. Die resultierende Spektraldichte zeigt die relative Stärke der verschiedenen Frequenzen in der Zeitreihe. Dies ist nützlich, um periodische Muster oder Trends in den Daten zu erkennen.

3.2 Maximum-Likelihood (ML) Methode

Die Maximum-Likelihood (ML) Methode ist eine statistische Methode zur Schätzung der Parameter eines Zeitreihenmodells. Sie basiert auf der Idee, dass die Wahrscheinlichkeit der beobachteten Daten gegeben die Parameter des Modells maximiert werden soll. In der Praxis wird dies oft durch die Minimierung der negativen Log-Likelihood-Funktion erreicht. Die ML-Methode ist besonders nützlich für die Schätzung von Parametern in nicht-linearen Modellen, wie zum Beispiel in der GARCH-Modellierung für Volatilität. Sie liefert konsistente und effiziente Schätzungen, vorausgesetzt, das Modell ist richtig spezifiziert. Die Methode ist jedoch anfällig für lokale Extrema, was die Interpretation der Ergebnisse erschweren kann.

Die ML-Methode ist eine weit verbreitete Technik zur Parameterschätzung in der Zeitreihenanalyse. Sie ist besonders geeignet für Modelle, bei denen die Likelihood-Funktion explizit formuliert werden kann. Die Methode ist flexibel und kann auf eine Vielzahl von Modellen angewendet werden, von linearen ARMA-Modellen bis hin zu komplexen nicht-linearen Modellen. Die Schätzungen sind in der Regel von guter Qualität, wenn die Annahmen der ML-Methode erfüllt sind.

Die ML-Methode ist eine wichtige Komponente der Zeitreihenanalyse. Sie ermöglicht es, die Parameter eines Modells so zu schätzen, dass die Wahrscheinlichkeit der beobachteten Daten maximiert wird. Dies ist ein zentraler Aspekt der statistischen Inferenz in der Zeitreihenanalyse.

4 Harmonische Analyse

Im letzten Abschnitt wurden Methoden vorgestellt, die die Schätzung von Autospektren von Prozessen mit kontinuierlichen Spektren erlauben. Natürlichen Prozessen liegen jedoch häufig diskrete bzw. gemischte Spektren zugrunde (s. Abschn. 3.1). Grundsätzlich lassen sich zwei Testsituationen unterscheiden:

1. Harmonische Komponenten in *weißem* Rauschen (diskretes Spektrum): In diesen Fällen muß entschieden werden, ob die in einem geschätzten Spektrum vorhandenen lokalen Maxima ('peaks') durch eine harmonische Komponente im Signal hervorgerufen wurden, oder ob es sich um zufällige Fluktuationen handelt.
2. Harmonische Komponenten in *farbigem* Rauschen (gemischtes Spektrum): Bei dieser Fragestellung muß entschieden werden, ob ein Scheitelwert in einem Periodogramm durch eine harmonische Komponente, oder durch ein lokales Maximum des kontinuierlichen Hintergrundspektrums verursacht wird (vergl. Abb. 4c).

Sämtliche der in diesem Abschnitt vorgestellten Testverfahren basieren auf einem Periodogramm, das mit Hilfe der in Abschnitt 3.2 beschriebenen Methoden bestimmt wurde. Daher lassen sich diese Testverfahren auch auf nicht äquidistante Daten anwenden.

4.1 Tests für harmonische Komponenten in weißem Rauschen

Die folgenden Testverfahren nutzen die Tatsache aus, daß die Periodogrammwerte wie χ^2 -Zufallsvariablen verteilt sind (s. Abschn. 3.2). Unter der **Nullhypothese**, daß eine Zeitreihe $x(t)$ aus **weißem Rauschen** besteht, wird versucht, unter Berücksichtigung der χ^2 -Verteilung diejenigen Periodogrammwerte herauszufinden, die nicht mit der Nullhypothese in Einklang stehen (Percival und Walden, 1993, S. 489).

Zunächst soll ein von Fisher (1929) entwickelter Test beschrieben werden. Hierbei wird die Nullhypothese: 'bei einer bestimmten Frequenz besteht das Signal aus weißem Rauschen', gegen die Alternativhypothese: 'bei einer bestimmten Frequenz ist *eine* periodische Schwingung vorhanden' für alle diskreten Frequenzen im Intervall $[0, f_{N/q}]$ getestet. Diese Testform impliziert allerdings, daß eventuell vorhandene periodische Komponenten genau mit den diskreten Frequenzen des Periodogramms übereinstimmen! Bei der Verwendung der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation sollte daher eine relativ hohe Überbeprobung ('oversampling') gewählt werden, um eine möglichst hohe Frequenzauflösung zu erzielen (s. Beispiel in Abschn. 8.3.1).

Gegeben seien die an m unabhängigen Frequenzen geschätzten Periodogrammamplituden einer Zeitreihe, $\hat{P}(f_k)$. (NB: $\hat{P}(f_k)$ ist identisch mit $\hat{G}_{xx}(f_k)$ für den Fall, daß ein Rechteckfenster verwendet wurde und keine Glättung des Rohspektrums vorgenommen wurde.) Die Teststatistik g für den Test ist:

4. Harmonische Analyse

$$g \equiv \frac{\max_{1 \leq k \leq m} \hat{P}(f_k)}{\sum_{j=1}^m \hat{P}(f_j)} . \quad (34)$$

Nach dem Parsevalschen Theorem ist der Nenner unter der Nullhypothese ein Maß für die Varianz des weißen Rauschens. Die Teststatistik mißt folglich das Verhältnis zwischen maximalem Varianzanteil bei einer Frequenz und der Gesamtvarianz. Fisher (1929) hat die Verteilung von g unter der Nullhypothese hergeleitet, wodurch kritische Werte g_f für den Test bestimmt werden können. Percival und Walden (1993, S. 491) geben dafür folgende Näherungsformel an:

$$g_f \approx 1 - (\alpha/m)^{1/(m-1)} , \quad (35)$$

wobei α das Signifikanzniveau und m die Anzahl der unabhängigen Periodogrammwerte ist. Die Nullhypothese (weißes Rauschen) wird abgelehnt, wenn $g > g_f$ ist. Dann kann auf dem Signifikanzniveau α angenommen werden, daß der höchste Wert von $\hat{P}(f_k)$ durch eine periodische Signalkomponente hervorgerufen wurde.

Der wesentliche Nachteil des Tests nach Fisher liegt in der Alternativhypothese, wonach nur auf die Gegenwart *einer* periodischen Komponente im Signal getestet wird. Siegel (1980) hat den Fisher Test in der Form erweitert, daß die Alternativhypothese die Möglichkeit *mehrerer* periodischer Komponenten im Signal beinhaltet. Dieser Test basiert auf einem normierten Periodogramm der Form:

$$\tilde{P}(f_k) \equiv \frac{\hat{P}(f_k)}{\sum_{j=1}^m \hat{P}(f_j)} . \quad (36)$$

Anstatt nur das Maximum eines Periodogramms zu berücksichtigen, werden alle Periodogrammwerte, die größer als ein kritischer Wert g_s ($0 \leq g_s \leq g_f$) sind, für den Test herangezogen. Siegel (1980) stellt die Beziehung zwischen g_s und g_f über einen frei wählbaren Parameter her: $g_s = \lambda g_f$, wobei $0 \leq \lambda \leq 1$ ist. Die Summe der Periodogrammwerte, die größer als g_s sind, bilden dann folgende Teststatistik:

$$T_\lambda \equiv \sum_{k=1}^m \left(\tilde{P}(f_k) - \lambda g_f \right)_+ , \quad (37)$$

worin $(\cdot)_+$ bedeutet, daß nur positive Differenzen berücksichtigt werden. Für $\lambda = 1$ ist diese Teststatistik identisch zu Fishers g . Siegel (1980), sowie Percival und Walden (1993, S. 493) geben kritische Werte, $t_{\lambda, \alpha}$, für diesen Test an, die sich für $20 < m < 2000$ durch folgende Näherungsformel bestimmen lassen (vergl.

Percival & Walden, 1993, S.493f):

$$t_{\lambda;\alpha} = a m^b, \quad (38)$$

wobei die Koeffizienten a, b für verschiedenen Werte von λ und α in Tabelle 3 aufgeführt sind.

Ähnlich wie bei dem Test nach Fisher wird die Nullhypothese abgelehnt, wenn $T_\lambda > t_{\lambda;\alpha}$ ist. In diesem Fall sind eine oder mehrere periodische Komponenten im Signal vorhanden. Siegel (1980) hat mit Hilfe von Monte-Carlo-Experimenten die Stärke seines Tests, in Gegenwart von 1-3 periodischen Komponenten, in Abhängigkeit von λ untersucht. Dabei hat sich gezeigt, daß der Test für $\lambda = 0.6$ und einer harmonischen Komponente praktisch die gleiche Aussagekraft besitzt wie der Test nach Fisher. Die Gegenwart von zwei periodischen Signalen führte mit $\lambda = 0.6$ und $\lambda = 0.4$ zur Ablehnung der Nullhypothese. Im Falle von drei periodischen Komponenten sollte $\lambda = 0.4$ gewählt werden, um den Test möglichst effizient zu nutzen. Leider hat Siegel (1980) nur Signale mit maximal drei harmonischen Komponenten untersucht, so daß nicht klar ist, ob mit diesem Test auch sinnvolle Resultate bei einer noch größeren Zahl harmonischer Komponenten zu erreichen wären. In Abschnitt 8.3 wird die Anwendung der Tests von Fisher und Siegel an zwei Beispielen demonstriert.

Tab. 3: Koeffizienten zur Berechnung des kritischen Wertes $t_{\lambda;\alpha}$ nach Gleichung 38. Die angegebenen Werte erweitern die von Percival und Walden (1993, S. 493) angegebenen Koeffizienten um Werte für $\lambda = 0.4$. Die Bestimmung der Koeffizienten erfolgte entsprechend der von Siegel (1979) entwickelten Näherung für die kritischen Werte (vergl. Percival und Walden, 1993, S. 493f).

	$\lambda = 0.4$	$\lambda = 0.6$
$\alpha = 0.05$	$a = 0.9842$ $b = -0.51697$	$a = 1.033$ $b = -0.72356$
$\alpha = 0.01$	$a = 1.3128$ $b = -0.59518$	$a = 1.4987$ $b = -0.79695$

Scargle (1982) hat ebenfalls einen Test zum Aufspüren eines harmonischen Signals in weißem Rauschen entwickelt, das ebenfalls auf der Chi²-Verteilung der Periodogrammwerte beruht. Da die Anzahl der Freiheitsgrade in diesem Fall zwei ist (vergl. Gl. 16), entspricht die Chi²-Verteilung genau einer Exponentialverteilung (z.B. Priestley, 1989, S. 66). Es sei

$$\gamma = \max_{1 \leq m \leq k} \frac{\hat{P}(f_k)}{\sigma_\epsilon^2}.$$

4. Harmonische Analyse

Unter der Nullhypothese (weißes Rauschen) ist γ der maximale Wert der m unabhängigen χ^2_2 Zufallsvariablen. Für die Wahrscheinlichkeit, daß γ größer als ein beliebiger Wert z ist, ergibt sich dann (Scargle, 1982):

$$P[\gamma > z] = 1 - (1 - e^{-z})^m.$$

Diese Gleichung gibt die Verteilung von γ unter der Nullhypothese an. Die Nullhypothese wird abgelehnt, wenn $P[\gamma \geq z] = \alpha$ ist. Praktisch bedeutet dies, daß für ein gegebenes Signifikanzniveau α der kritische Wert z bestimmt wird. Die Periodogrammmamplituden unterhalb dieses Wertes müssen dann als zufällige Fluktuationen aufgefaßt werden (der kritische Wert z wird daher auch als 'false alarm level' bezeichnet [Scargle, 1982]). Ist die größte Amplitude des Periodogramms größer als dieser kritische Wert, dann wird die Alternativhypothese angenommen. In diesem Falle wäre eine periodische Komponente in der Zeitreihe vorhanden.

Der wesentliche Nachteil dieses Tests besteht darin, daß σ_e^2 bekannt sein muß. Dies ist in der Regel jedoch nicht der Fall. Horne und Baliunas (1986) schlagen vor, die Varianz der Ausgangsdaten σ_x^2 als Schätzer für σ_e^2 zu benutzen. Dieses Verfahren kann aber nur dann annäherungsweise zum Erfolg führen, wenn sichergestellt ist, daß die Varianz der Zeitreihe nicht durch die Varianzanteile periodischer Komponenten dominiert wird. Ein weiterer Nachteil besteht darin, daß wie bei dem Test nach Fisher nur von der Gegenwart *einer* harmonischen Komponente ausgegangen wird. Abschließend sei bemerkt, daß der von Scargle (1982) vorgeschlagene Test praktisch identisch zu dem von Schuster (1898) propagierten Test ist.

Bei der Anwendung der LS-Fourier-Transformation im Zusammenhang mit der harmonischen Analyse ist zu beachten, daß bei einer Überbeprobung (oversampling > 1) für den Wert m in den obigen Gleichungen die Anzahl der *unabhängigen* Frequenzen benutzt wird (s. Abschn. 3.3).

4.2 Tests für harmonische Komponenten in farbigem Rauschen

Wie bereits erwähnt, muß in dieser Testsituation entschieden werden, ob ein Scheitelwert in einem Periodogramm durch eine harmonische Komponente oder durch ein lokales Maximum des kontinuierlichen Hintergrundspektrums verursacht wird (Priestley, 1989, S. 619). Im Vergleich zu den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Testverfahren besteht das wesentliche Problem hierbei in der Formulierung der Nullhypothese. Dieses liegt daran, daß im Gegensatz zum weißen Rauschen, das der Nullhypothese zugrundeliegende farbige Rauschen nicht eindeutig definiert ist (s. Abschn. 3.1).

Ein einfaches Testverfahren ist der sog. **gruppierte Periodogramm-Test**, der eine Modifikation des Tests nach Fisher darstellt (Priestley, 1989, S. 620). Dazu werden die m unabhängigen Periodogrammwerte in k gleichgroße Gruppen eingeteilt. Unter der Annahme, daß das Hintergrundspektrum sich nur langsam mit der Frequenz ändert, kann weiter angenommen werden, daß das Hintergrundspektrum in jeder Gruppe

konstant ist. Darauf aufbauend wird eine Nullhypothese entsprechend Gleichung 34 für jede Gruppe formuliert und anschließend mit einem Test nach Fisher überprüft. Dieser Test bringt allerdings eine Reihe von Nachteilen mit sich. Die Annahme eines konstanten Hintergrundspektrums wird umso wahrscheinlicher, je kleiner die Gruppen werden. Gleichzeitig sinkt aber auch die Anzahl der Freiheitsgrade für den Fisher Test, so daß ein sicheres Erkennen periodischer Komponenten immer unwahrscheinlicher wird (g_f steigt, wenn m kleiner wird [Gl. 35]). Ein weiterer Nachteil liegt, wie bereits beim Fisher Test erläutert, in der Formulierung der Alternativhypothese, die von lediglich *einer* harmonischen Komponente ausgeht. Da es kein objektives Kriterium für die Wahl der Anzahl der Gruppen gibt (Priestley, 1989, S. 626), besteht die Möglichkeit, k solange zu variieren, bis eine harmonische Komponente 'herbeigetestet' wird.

Neben diesem einfachen Test gibt es noch weitere Testverfahren, um periodische Komponenten in farbigem Rauschen zu detektieren (s. ausführliche Zusammenfassung bei Priestley, 1989, Kap. 8). Diese Verfahren besitzen allerdings zum Teil ähnliche Schwachstellen wie der gruppierte Periodogramm- Test oder sie sind ungeeignet für nicht äquidistante Daten. Zur letzten Gruppe gehören Tests, die entweder auf Spektren höherer Ordnung, d.h. Bi- bzw. Trispektren (Lii und Tsou, 1992), oder auf der in Abschnitt 3.4 beschriebene Multitaper-Methode (Percival und Walden, 1993, S. 496ff; Lees und Park, 1995) basieren.

4. Harmonische Analyse

5 Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

Ziel der bisher vorgestellten Methoden zur Schätzung des Autospektrums war es, die in einer Zeitreihe enthaltene Varianz als Funktion der Frequenz darzustellen. Im folgenden soll dieser Ansatz um die Fragestellung erweitert werden, ob zwei Zeitreihen Varianzanteile im gleichen Frequenzbereich besitzen und, wenn ja, wie die Beziehung der zugrundeliegenden Prozesse in diesem Frequenzbereich ist. Ein Hilfsmittel zur Beantwortung derartiger Fragen ist die sog. **Kreuzspektralanalyse**, die besonders geeignet ist, um Rückschlüsse auf ein **Übertragungssystem** zu ziehen. Wenn beispielsweise $x(t)$ die empfangene Sonnenenergie eines Ortes auf der Erde und $y(t)$ ein beliebiger, meßbarer und von $x(t)$ abhängiger Klimaindikator ist, dann wird die in $x(t)$ vorhandene Information durch das Klimasystem in $y(t)$ übertragen. Formal läßt sich eine solche Übertragung folgendermaßen darstellen:

$$x(t) \rightarrow H(f) \rightarrow y(t) ,$$

worin $H(f)$ eine frequenzabhängige **Übertragungsfunktion** ist. Einfache Beispiele für $H(f)$ sind:

- eine Verzögerung zwischen $x(t)$ und $y(t)$, die konstant oder auch eine Funktion der Frequenz sein kann,
- die bevorzugte Übertragung bestimmter Frequenzbereiche.

Werden die Funktionen $x(t)$ und $y(t)$ mit Hilfe der Fourier-Transformation in den Frequenzbereich übertragen, dann kann gezeigt werden, daß

$$G_{yy}(f) = |H(f)|^2 G_{xx}(f)$$

ist und weiterhin

$$G_{xy}(f) = H(f) G_{xx}(f) ,$$

worin $G_{xy}(f)$ das sog. Kreuzspektrum ist (Bendat und Piersol, 1986, S. 165f).

5.1 Kreuzspektrum

Das Kreuzspektrum $G_{xy}(f)$ zweier Zeitreihen $x(t)$ und $y(t)$ ist gegeben durch

$$G_{xy}(f) = \mathcal{F} x(t) \mathcal{F}^* y(t) ,$$

worin $*$ eine konjugierte komplexe Größe anzeigt, d.h., daß das Vorzeichen der imaginären Komponente dieser Größe umgekehrt wird. Das Kreuzspektrum ist also das Produkt aus der Fourier-Transformierten der

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

ersten Zeitreihe und der konjugierten Fourier-Transformierten der zweiten Zeitreihe (z.B. Bendat und Piersol, 1986, S.133f). Im Gegensatz zum reellen Autospektrum stellt das Kreuzspektrum eine *komplexe* Größe dar. Zur Schätzung des Kreuzspektrums zweier diskreter Zeitreihen, werden zunächst nach Gleichung 11 die Fourier-Transformationen beider Zeitreihen bestimmt. Da in Bezug auf Erwartungstreue des Schätzers, Bandbreite und Leckeffekt das in den Abschnitten 3.2 und 3.2.1 Gesagte auch bei der Berechnung des Kreuzspektrums gilt (die Ursache für diese Probleme liegt ja in der Fourier-Transformation selbst), kommen die entsprechenden Gegenmaßnahmen auch hier zur Anwendung. Praktisch bedeutet dies, daß die Zeitreihen zunächst segmentiert werden (die WOSA- Methode kann auch hier verwendet werden) und mit einer Fensterfunktion gewichtet werden. Anschließend werden die Rohkreuzspektren für alle Segmente berechnet. Die Mittellung der Rohkreuzspektren mit Hilfe einer modifizierten Version von Gleichung 18 führt schließlich zur Schätzung des **komplexen Kreuzspektrums** (z.B. Bendat und Piersol, 1993, S. 407f):

$$\hat{G}_{xy}(f_n) = \frac{2}{n_d N \Delta t} \sum_{i=1}^{n_d} \left[X_i(f_n) Y_i^*(f_n) \right] \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad (39)$$

Wird der Betrag des komplexen Kreuzspektrums $|\hat{G}_{xy}(f_n)|$ gegen die Frequenz aufgetragen, erhält man das sog. **Kreuzamplitudenspektrum** (kurz: Kreuzspektrum). Maxima von $|\hat{G}_{xy}(f_n)|$ spiegeln Frequenzbereiche wider, in denen sowohl $x(t)$ als auch $y(t)$ Varianz enthalten, d.h., daß die Kovarianz der zugrundeliegenden Prozesse in diesem Frequenzbereich ebenfalls relativ hoch ist (Abb. 16).

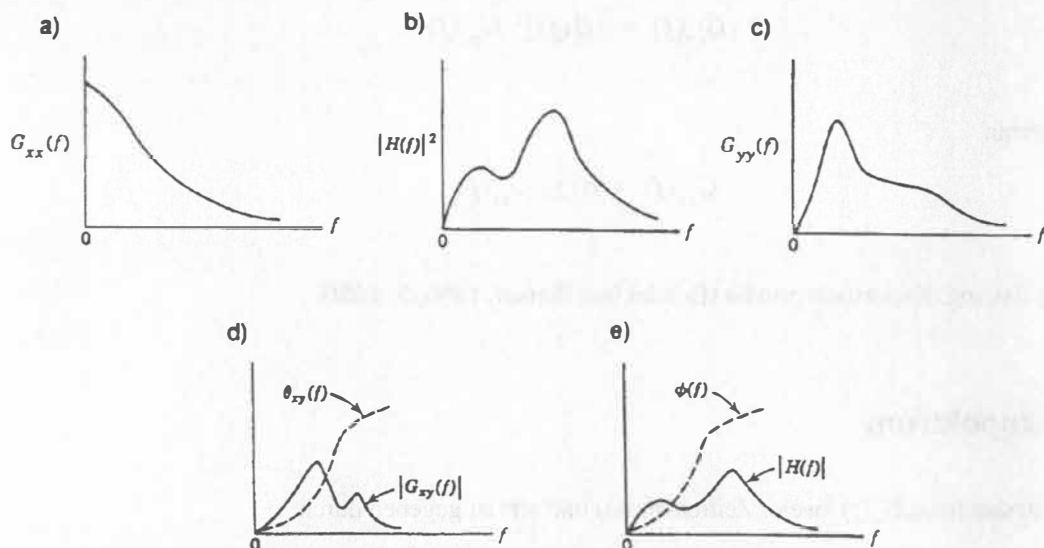


Abb. 16: Beispielfür die Beziehungen verschiedener Größen im Frequenzbereich. a) Autospektrum eines Eingangssignals $x(t)$. b) Übertragungsfunktion. c) Autospektrum des Ausgangssignals $y(t)$. d) Kreuzspektrum und e) Phasenspektrum (aus: Bendat und Piersol, 1986).

Aus Gleichung 39 ist leicht zu erkennen, daß die Amplituden von $|\hat{G}_{xy}(f_n)|$ von den absoluten Werten der Ausgangszeitreihen $x(t)$ und $y(t)$ abhängen. Hierdurch wird die Möglichkeit, verschiedene Kreuzamplitudenspektren miteinander zu vergleichen, stark eingeschränkt. Aus diesem Grund wird das Kreuzamplitudenspektrum in der Praxis nur selten zur Dateninterpretation herangezogen und statt dessen das im folgenden Abschnitt beschriebene Kohärenzspektrum verwendet (Jenkins und Watts, 1968, S. 359). Ein weiteres Problem besteht darin, daß die Bestimmung von Konfidenzintervallen für $|\hat{G}_{xy}(f_n)|$ im Vergleich zu Autospektren sehr rechenaufwendig ist, da die Verteilung von $|\hat{G}_{xy}(f_n)|$ einer Wishartverteilung entspricht (Koopmans, 1974, S.280f) und in der Praxis nicht durchgeführt wird.

5.2 Kohärenzspektrum

Das Verhältnis aus dem Quadrat des Absolutwertes des komplexen Kreuzspektrums und dem Produkt der Autospektren zweier Zeitreihen $x(t)$ und $y(t)$ wird als Kohärenzfunktion bezeichnet ('coherency' bzw. manchmal als 'squared coherency'; vergl. Julian, 1975). Ein entsprechender Schätzer ist (z.B. Bendat und Piersol, 1986, S. 137):

$$\hat{c}_{xy}^2(f) \equiv \frac{|\hat{G}_{xy}(f)|^2}{\hat{G}_{xx}(f) \hat{G}_{yy}(f)} \quad (40)$$

Die Kohärenz $c_{xy}^2(f)$ ist eine dimensionslose Zahl mit $0 \leq c_{xy}^2(f) \leq 1$ für alle f . Die Darstellung von $c_{xy}^2(f)$ gegen die Frequenz wird als Kohärenzspektrum bezeichnet. Es ist wichtig, daß in Gleichung 40 konsistente Schätzungen der drei Spektren und keine Rohspektren verwendet werden.

In Analogie zum linearen Bestimmtheitsmaß, r^2 , kann die Kohärenz als ein Maß für die Stärke einer linearen Beziehung zwischen $x(t)$ und $y(t)$ bei einer bestimmten Frequenz interpretiert werden (z.B. Jenkins und Watts, 1968, S. 353; Bendat und Piersol, 1986, S. 172f). Wird ein lineares Übertragungssystem zwischen $x(t)$ und $y(t)$ vorausgesetzt, gibt die Kohärenz den Anteil von $y(t)$ an, der bei einer Frequenz f durch $x(t)$ hervorgerufen wird (Bendat und Piersol, 1986, S. 172). Diese Interpretation birgt jedoch eine gewisse Gefahr, denn der Umkehrschluß ist nicht gültig, d.h. *eine hohe Kohärenz ist keine hinreichende Bedingung, um auf das Vorhandensein einer linearen Beziehung zwischen $x(t)$ und $y(t)$ zu schließen* (s. Bendat und Piersol, 1986, S. 172f)! (Diese Aussage ist wiederum analog zum linearen Bestimmtheitsmaß, obwohl häufig fälschlicherweise angenommen wird, daß das lineare Bestimmtheitsmaß identisch mit einem Test für ein lineares Modell ist [s. Diskussion in Stoyan, 1993, S. 214]). In der geologischen Literatur finden sich allerdings einige Beispiele, in denen ein lineares Übertragungssystem (spez. Klimasystem) aufgrund einer hohen Kohärenz postuliert wurde (z.B. Clemens et al., 1993; Hovan et. al., 1991; Imbrie et al., 1989; Kominz und Pisias, 1979).

Aus dem Gesagten folgt, daß die Kohärenz zweier unkorrelierter Zufallsprozesse Null für alle Frequenzen ist. Ist die Kohärenzfunktion größer als Null und kleiner als eins, dann kann eine der folgenden Situationen bzw. eine Kombination daraus vorliegen (Bendat und Piersol, 1986, S. 172):

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

- die gemessenen Zeitreihen enthalten eine zufällige Rauschkomponente,
- die Übertragung von $x(t)$ nach $y(t)$ erfolgt durch ein nicht lineares Übertragungssystem bzw.
- das Ausgangssignal $y(t)$ wird sowohl durch ein linear übertragenes Eingangssignal $x(t)$ als auch durch weitere Eingangssignale hervorgerufen.

Wird die Kohärenz nach Gleichung 40 geschätzt, dann weist die so geschätzte Kohärenz in der Regel einen **systematischen Fehler** auf, der zwei Ursachen hat (zur besseren Übersichtlichkeit wird die Abhängigkeit von der Frequenz im folgenden nicht mit dargestellt):

1. Wegen

$$E \left[\hat{c}_{xy}^2 \right] = E \left[\frac{|\hat{G}_{xy}|^2}{\hat{G}_{xx} \hat{G}_{yy}} \right] \neq \frac{E \left[|\hat{G}_{xy}|^2 \right]}{E \left[\hat{G}_{xx} \right] E \left[\hat{G}_{yy} \right]}$$

führt eine Schätzung der Kohärenz nach Gleichung 40 im allgemeinen zu dem Ergebnis $E \left[\hat{c}_{xy}^2 \right] \neq c_{xy}^2$ (Bendat und Piersol, 1986, S. 304). Genauer gesagt, der systematische Fehler bewirkt eine **Überschätzung** der tatsächlichen Kohärenz (Benignus, 1969). Carter et al. (1973) geben neben einer exakten Quantifizierung folgende Näherungsformel zur Abschätzung des systematischen Fehlers an:

$$b \left[\hat{c}_{xy}^2 \right] \approx \frac{(1 - \hat{c}_{xy}^2)^2}{n_{eff}} . \quad (41)$$

Dieser Fehler ist in den meisten Fällen vernachlässigbar klein. So ergibt sich beispielsweise für $n_{eff} = 3$ und $\hat{c}_{xy}^2 = 0.7$ ein systematischer Fehler von lediglich $\sim 4\%$.

2. Eine weiterer Fehler kann auftreten, wenn die Zeitreihen entlang der Zeitachse gegeneinander verschoben sind. Sei

$$\begin{aligned} x(t) &= x(t) & 0 \leq t \leq T, \\ y(t) &= \begin{cases} 0 & 0 \leq t < \tau_0 \\ x(t - \tau_0) & \tau_0 \leq t \leq T, \end{cases} \end{aligned}$$

wobei τ_0 die zeitliche Verschiebung zwischen den Signalen ist. In diesem Fall gilt (Bendat und Piersol, 1986, S. 305):

$$\hat{c}_{xy}^2 \approx \left(1 - \frac{\tau_0}{T} \right) c_{xy}^2 ,$$

d.h., je größer τ_0 im Verhältnis zu T ist, desto stärker tritt dieser systematische Fehler in Erscheinung. Man kann diesen Fehler vermeiden, indem man vor der Analyse die Zeitreihe $y(t)$ um τ_0 entlang der Zeitachse verschiebt und beide Zeitreihen somit in zeitliche Übereinstimmung miteinander bringt (Bendat und Piersol, 1986, S. 305). In der englischsprachigen Literatur wird diese Vorgehensweise als '**Alignment-Technik**' bezeichnet (z.B. Priestley, 1989, S. 710f; Jenkins und Watts, 1968, S. 399f). Praktisch kann die Verschiebung so erfolgen, daß bei der Fourier-Transformation bei einer der beiden Zeitreihen in Gleichung 30 $t_f = \tau_0$ gesetzt wird. Da τ_0 in der Regel nicht bekannt ist, muß diese Größe aus den Daten geschätzt werden. Dazu kann das im folgenden Abschnitt beschriebene Phasenspektrum verwendet werden.

3. Werden zur Schätzung der Kohärenz (Gl. 40) Rohspektren (also Spektren die auf *nicht* segmentierten Zeitreihen basieren) verwendet, kann gezeigt werden, daß $\hat{c}_{xy}^2(f) = \text{const.} = 1$ für alle f , unabhängig von der tatsächlichen Kohärenz (Priestley, 1989, S. 708). Durch die Glättung des Kreuz- und der Autospektren in Gleichung 40 kann ein systematischer Fehler auftreten, der analog zu dem in Abschnitt 3.2 beschriebenen Fehler bei der Autospektralschätzung ist. Die diskrete Frequenzachse des geschätzten Kohärenzspektrums führt dazu, daß die bei einer Frequenz f geschätzte Kohärenz in Wirklichkeit eine Mittelung der tatsächlichen Kohärenzfunktion über ein Intervall $f \pm \Delta f$ darstellt. Unter Berücksichtigung einer Fensterfunktion erfolgt die Mittelung über ein Intervall der Größe $f \pm B_w$. Der durch die Mittelung hervorgerufene systematische Fehler ist wiederum proportional zur ersten Ableitung der tatsächlichen Kohärenzfunktion in dem entsprechenden Frequenzintervall.

Eine 'zu geringe' Glättung wirkt demnach in Richtung eines frequenzunabhängigen und verfälschten Kohärenzspektrums. Wird andererseits eine 'zu starke' Glättung gewählt, dann verstärkt sich der durch die Mittelung hervorgerufene systematische Fehler. Das Problem liegt also in der 'optimalen' Wahl der Glättung. Wird B_w entsprechend Gl. 30 gewählt, kann davon ausgegangen werden, daß die nach Gleichung 40 bestimmte Kohärenz eine brauchbare Schätzung darstellt (Priestley, 1989, S. 708).

Um ein Kohärenzspektrum beurteilen zu können, ist es notwendig, eine Aussage über die Signifikanz eines bestimmten Wertes der Kohärenzfunktion zu machen. Weiterhin ist es wünschenswert, Konfidenzintervalle für die Kohärenzfunktion zu schätzen. Carter et al. (1973) geben, neben einer exakten Verteilungsfunktion der Kohärenzfunktion, folgende Näherungsformel für die Varianz an:

$$\text{Var} [\hat{c}_{xy}^2] \approx \frac{2 \hat{c}_{xy}^2 (1 - \hat{c}_{xy}^2)^2}{n_{eff}}.$$

Damit ergibt sich für den relativen Standardfehler der Kohärenzschätzung:

$$\epsilon_r [\hat{c}_{xy}^2] = \frac{\sigma [\hat{c}_{xy}^2]}{\hat{c}_{xy}^2} \approx \frac{\sqrt{2} (1 - \hat{c}_{xy}^2)}{|\hat{c}_{xy}| \sqrt{n_{eff}}}. \quad (42)$$

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

Weiterhin ist zu beachten, daß für die letzte Gleichsetzung in Gleichung 41 angenommen wurde, daß $\hat{c}_{xy}^2 \approx c_{xy}^2$ und somit ein erwartungstreuer Schätzer für die Kohärenz ist (Bendat und Piersol, 1986, S. 310). Weiterhin ist zu beachten, daß *vor* der Anwendung von Gleichung 40 der systematische Fehler aus Gleichung 41 von der geschätzte Kohärenz subtrahiert werden sollte (Benignus, 1969).

Für die Bestimmung von **Konfidenzintervallen** ist es notwendig, die Verteilungsfunktion der Kohärenzfunktion zu integrieren. Die von Carter et al. (1973) angegebene Verteilungsfunktion setzt sich aus einer endlichen Summe ${}_2F_1$ -hypergeometrischer Funktionen zusammen. Die bei der numerischen Integration dieser Funktion (für große Werte von n_{eff} und c_{xy}^2) auftretenden Instabilitäten erfordern eine Reihe von relativ rechenaufwendigen Gegenmaßnahmen. Scannell und Carter (1978) haben einen Algorithmus entwickelt, mit dessen Hilfe sich Konfidenzintervalle für das Kohärenzspektrum bestimmen lassen (Abb. 17). Wie bereits bei der Bestimmung des relativen Standardfehlers ist auch hierbei zu beachten, daß der systematische Fehler aus Gleichung 41 von der geschätzten Kohärenz vor der Bestimmung von Konfidenzintervallen subtrahiert werden sollte.

Enochson und Goodman (1965) haben in Anlehnung an das lineare Bestimmtheitsmaß vorgeschlagen, Konfidenzintervalle für die Kohärenzfunktion mit Hilfe von Fishers z-Transformation zu bestimmen. Dazu wird das geschätzte Kohärenzspektrum zunächst folgendermaßen transformiert: $\hat{k}_{xy} \equiv \tanh^{-1} |\hat{c}_{xy}|$. Die transformierten Werte \hat{k}_{xy} sind annähernd normalverteilt und ihre Varianz ist leicht bestimmbar, so daß Konfidenzintervalle angegeben werden können. Die Vorteile dieser Methode liegen einerseits in der einfachen Berechnung der Konfidenzintervalle und andererseits in der Frequenzunabhängigkeit der Konfidenzintervalle bei Verwendung einer \tanh^{-1} Skala (Jenkins und Watts, 1968, S. 379). Der wesentliche Nachteil dieser Methode liegt darin, daß die transformierten Werte \hat{k}_{xy} nur dann annähernd normalverteilt sind, wenn die folgenden Bedingungen gelten $n_{eff} \geq 20$ und $0.4 \leq c_{xy}^2 \leq 0.95$ (Enochson und Goodman, 1965). Da bei der Analyse paläoklimatischer Zeitreihen in der Regel $n_{eff} < 20$ ist (um die erforderliche 6 dB-Bandbreite zu erzielen), sollte dieser Ansatz nach Möglichkeit nicht verwendet werden und statt dessen der von Scannell und Carter (1978) beschriebenen Methode der Vorzug gegeben werden, die auch im Programm verwendet wird.

Neben der Bestimmung von Konfidenzintervallen ist es genauso wichtig zu entscheiden, ob die Kohärenz bei einer bestimmten Frequenz signifikant ist oder lediglich durch zufällige Schwankungen hervorgerufen wird. Unter der Nullhypothese $\hat{c}_{xy}^2 = 0$ ergibt sich folgender kritischer Wert für die Kohärenz (z.B. Carter, 1977):

$$z_{xy}^2 \equiv 1 - \alpha^{1/(n_{eff}-1)}, \quad (43)$$

d.h. eine Kohärenz der Größe z_{xy}^2 ist mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit α durch zufällige Schwankungen bei der Schätzung der Kohärenz hervorgerufen worden. z_{xy}^2 stellt also das Niveau *keiner* signifikanten Kohärenz dar und wird meistens zusammen mit dem Kohärenzspektrum dargestellt. Konfidenzintervalle sollten nur für diejenigen Werte des Kohärenzspektrums bestimmt werden, für die gilt $\hat{c}_{xy}^2 > z_{xy}^2$ (Bloomfield, 1976, S. 227).

5.3 Phasenspektrum

In Abschnitt 2.1 wurde das Prinzip der Phasenverschiebung zwischen zwei Signalen erläutert (s. Abb. 2). In der Einleitung dieses Abschnittes wurde bereits erwähnt, daß es bei der Signalübertragung zu frequenz-abhängigen zeitlichen Verzögerungen bei der Übertragung kommen kann. Gemäß Gleichung 1 drücken sich solche Verzögerungszeiten ('time lags') in einer Phasenverschiebung zwischen Ein- und Ausgangssignal aus (Abb. 18). Einfache lineare Übertragungssysteme lassen sich durch eine Zeitverzögerung als Funktion der Frequenz hinreichend genau beschreiben (vergl. Bendat und Piersol, 1986, Kap. 2).

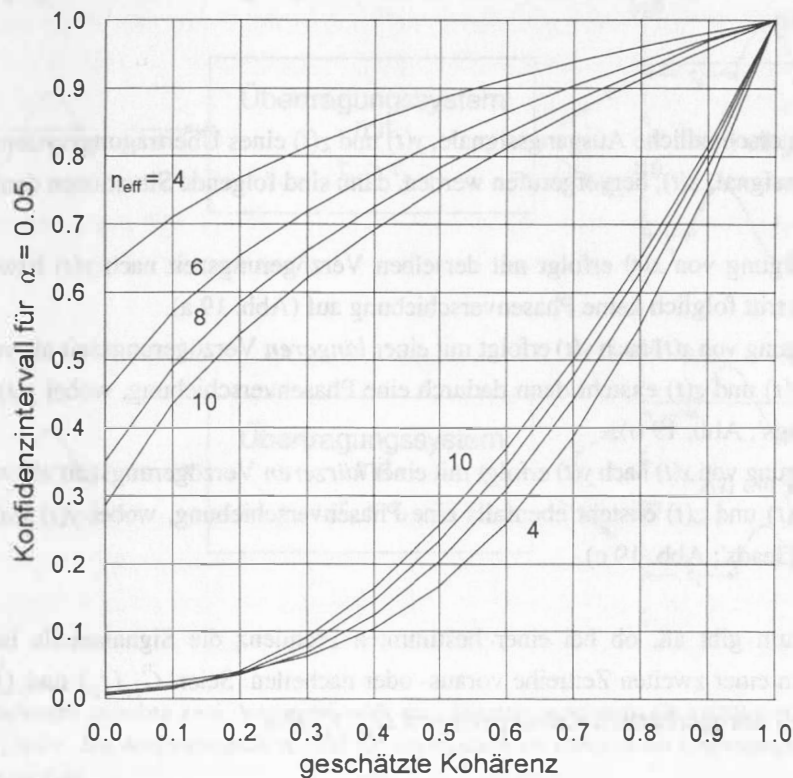


Abb. 17: Konfidenzintervalle der geschätzten Kohärenz für $\alpha = 0.05$. Die Zahlen an den Kurven geben die effektive Anzahl der Segmente an, aus denen das Kohärenzspektrum ermittelt wurde. Ablesebeispiel: Für eine geschätzte Kohärenz von 0.6 ergibt sich für $n_{\text{eff}} = 4$ ein Konfidenzintervall von [0.25, 0.93] (verändert nach Scannell und Carter, 1978).

Gelingt es also, die bei einer Signalübertragung auftretenden Phasenverschiebungen zu schätzen, erlauben die daraus abgeleiteten Verzögerungszeiten wesentliche Rückschlüsse auf das Übertragungssystem selbst. Dieser Ansatz ist bei paläoklimatischen Fragestellungen besonders vielversprechend. So haben bereits eine Reihe von Autoren (z.B. Imbrie et al., 1989, 1992, 1993; Mix et al., 1991; Pisias et al., 1990) versucht, anhand verschiedener mariner Paläoklimaindikatoren diverse Aspekte des Plio-/Pleistozänen Klimageschehens in seiner geographischen und zeitlichen Variabilität zu erfassen. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse bilden sowohl wichtige Eingabeparameter für Klimamodelle, als auch für die Verifikation von Modellergebnissen. Um die Phasenverschiebung und damit die Verzögerungszeiten zwischen zwei Zeitreihen als Funktion der Frequenz zu bestimmen, bedient man sich des sog. Phasenspektrums.

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

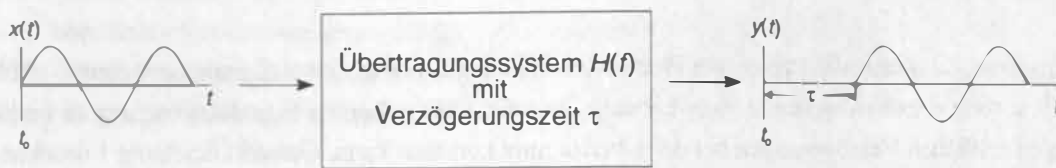


Abb. 18: Ein einfaches Übertragungssystem, daß zu einer zeitlichen Verzögerung τ zwischen dem Eingangssignal $x(t)$ und dem Ausgangssignal $y(t)$ führt.

Werden zwei unterschiedliche Ausgangssignale, $y(t)$ und $z(t)$ eines Übertragungssystems betrachtet, die durch *ein* Eingangssignal, $x(t)$, hervorgerufen werden, dann sind folgende Situationen denkbar:

- Die Übertragung von $x(t)$ erfolgt mit derselben Verzögerungszeit nach $y(t)$ bzw. $z(t)$. Zwischen $y(t)$ und $z(t)$ tritt folglich keine Phasenverschiebung auf (Abb. 19 a).
- Die Übertragung von $x(t)$ nach $y(t)$ erfolgt mit einer *längeren* Verzögerungszeit als von $x(t)$ nach $z(t)$. Zwischen $y(t)$ und $z(t)$ entsteht dann dadurch eine Phasenverschiebung, wobei $y(t)$ gegenüber $z(t)$ **nacheilt** ('lags'; Abb. 19 b).
- Die Übertragung von $x(t)$ nach $y(t)$ erfolgt mit einer *kürzeren* Verzögerungszeit als von $x(t)$ nach $z(t)$. Zwischen $y(t)$ und $z(t)$ entsteht ebenfalls eine Phasenverschiebung, wobei $y(t)$ jetzt gegenüber $z(t)$ **vorauselt** ('leads'; Abb. 19 c).

Das Phasenspektrum gibt an, ob bei einer bestimmten Frequenz die Signalanteile in einer Zeitreihe gegenüber denen in einer zweiten Zeitreihe voraus- oder nacheilen. Seien $\hat{C}_{xy}(f_k)$ und $\hat{Q}_{xy}(f_k)$ der reelle bzw. imaginäre Teil des geschätzten Kreuzspektrums, $\hat{G}_{xy}(f_k)$ also

$$\hat{G}_{xy}(f_k) = \hat{C}_{xy}(f_k) - i \hat{Q}_{xy}(f_k) ,$$

dann ist

$$\hat{\phi}_{xy}(f_k) = \tan^{-1} \left(\frac{-\hat{Q}_{xy}(f_k)}{\hat{C}_{xy}(f_k)} \right) \quad (44)$$

ein konsistenter und erwartungstreuer Schätzer für das Phasenspektrum (z.B. Jenkins und Watts, 1968, S. 346). Die Vorzeichen von $\hat{C}_{xy}(f_k)$ und $\hat{Q}_{xy}(f_k)$ bestimmen bei einer Frequenz f_k , ob $x(t)$ gegenüber $y(t)$ vorauselt oder, umgekehrt, ob $x(t)$ gegenüber $y(t)$ nacheilt.

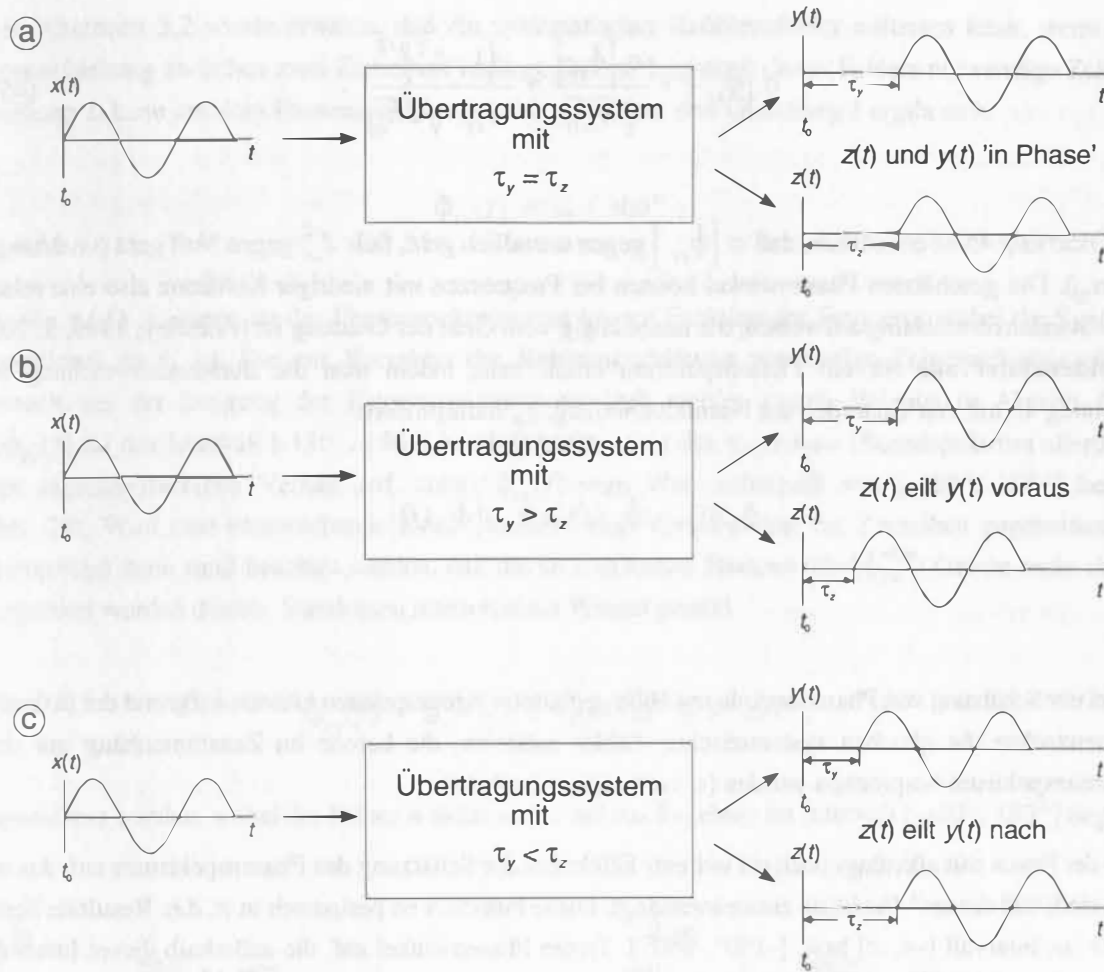


Abb. 19: Phasenbeziehungen zwischen zwei Ausgangssignalen eines Übertragungssystems für verschiedene Kombinationen der Verzögerungszeiten τ_y und τ_z . Die Ausgangssignale $y(t)$ und $z(t)$ werden durch ein gemeinsames Eingangssignal $x(t)$ hervorgerufen. Weitere Erläuterungen im Text.

Die Varianz des ungeglätteten Phasenspektrums (in [rad]) ist:

$$\text{Var} [\tilde{\Phi}_{xy}] = \frac{1 - c_{xy}^2}{2 c_{xy}^2},$$

wobei die Frequenzabhängigkeit der Größen zur besseren Übersicht wiederum nicht dargestellt ist. Für die Mittelung eines Phasenspektrums aus n_{eff} Segmenten ergibt sich damit folgende **Standardabweichung** für das geschätzte Phasenspektrum (Bendat und Piersol, 1986, S. 300f):

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

$$\sigma \left[\hat{\phi}_{xy} \right] = \frac{\sigma \left[\check{\phi}_{xy} \right]}{\sqrt{n_{eff}}} \approx \frac{\left(1 - \hat{c}_{xy}^2 \right)^{1/2}}{|\hat{c}_{xy}| \sqrt{2 n_{eff}}} . \quad (45)$$

Aus Gleichung 45 ist ersichtlich, daß $\sigma \left[\hat{\phi}_{xy} \right]$ gegen unendlich geht, falls \hat{c}_{xy}^2 gegen Null geht (unabhängig von n_{eff}). Die geschätzten Phasenwinkel können bei Frequenzen mit niedriger Kohärenz also eine relativ große Standardabweichung aufweisen, die unabhängig vom Grad der Glättung ist (Priestley, 1989, S. 703).

Konfidenzintervalle für ein Phasenspektrum erhält man, indem man die Standardabweichung aus Gleichung 45 mit den Quantilen der Normalverteilung, z_α , multipliziert:

$$\phi_{xy}(f) = \hat{\phi}_{xy}(f) \pm z_\alpha \sigma \left[\hat{\phi}_{xy}(f) \right] .$$

Bei der Schätzung von Phasenwinkeln mit Hilfe geglätteter Kreuzspektren können aufgrund der diskreten Frequenzachse die gleichen systematischen Fehler auftreten, die bereits im Zusammenhang mit dem Kohärenzspektrum besprochen wurden (s. vorheriger Abschnitt).

In der Praxis tritt allerdings noch ein weiterer Effekt bei der Schätzung des Phasenspektrums auf, das mit der Periodizität der \tan^{-1} -Funktion zusammenhängt. Diese Funktion ist periodisch in π , d.h. Resultate liegen immer im Intervall $[-\pi, \pi]$ bzw. $[-180^\circ, 180^\circ]$. Treten Phasenwinkel auf, die außerhalb dieses Intervalls liegen, werden folglich nicht länger die tatsächlichen Phasenwinkel bestimmt. So würden beispielsweise die wahren Phasenwinkel $\phi_{xy1} = -200^\circ$ bzw. $\phi_{xy2} = 520^\circ$ jeweils zu einem geschätzten Winkel von $\hat{\phi}_{xy} = 160^\circ$ führen, da sowohl $-200^\circ + 360^\circ = 160^\circ$, als auch $520^\circ - 360^\circ = 160^\circ$ ergeben. Diese **Mehrdeutigkeit der geschätzten Phasenwinkel** kann lediglich durch Annahmen bzw. bestehendes Hintergrundwissen über die beobachteten Prozesse umgangen werden. Teilweise macht sich dieser Effekt in einem Phasenspektrum durch 'Phasensprünge' von π nach $-\pi$ bzw. umgekehrt bemerkbar. Weiterhin ist zu beachten, daß ein geschätzter Phasenwinkel sich immer auf den zeitlichen Abstand zwischen zwei phasengleichen Punkten zweier Schwingungen bezieht. Dieses können z.B. Nulldurchgänge, Maxima oder Minima der beiden betrachteten Schwingungen sein (vergl. Abb. 2). Bei der Spektralanalyse geologischer Klimaindikatoren ist zu beachten, daß die Maximalwerte eines Indikators nicht unbedingt mit den Maxima einer anderen Größe korrelieren müssen. Nach der Milanković-Theorie korrelieren solare Einstrahlungsmaxima mit Minima des globalen Eisvolumens. Werden $\delta^{18}\text{O}$ Messungen zur Schätzung des Eisvolumens verwendet, entsprechen die höchsten (positiven) Isotopenwerte jedoch einem maximalen Eisvolumen. Um eine sinnvolle Phasenbeziehung zwischen maximaler Einstrahlung und minimalen $\delta^{18}\text{O}$ -Werten (= Eisminimum) zu bestimmen, ist daher eine Korrektur notwendig. Dazu wird entweder das Vorzeichen einer Zeitreihe umgekehrt oder ein geschätzter Phasenwinkel wird von 180° subtrahiert, um den tatsächlichen Winkel zu bestimmen (z.B. Howard und Prell, 1992; Imbrie et al., 1992).

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

In Abschnitt 5.2 wurde erwähnt, daß ein systematischer Kohärenzfehler auftreten kann, wenn eine Zeitverschiebung zwischen zwei Zeitreihen vorliegt. Die zur Korrektur dieses Fehlers notwendige Zeitverschiebung τ_0 kann aus dem Phasenspektrum geschätzt werden. Aus Gleichung 1 ergibt sich:

$$\phi_{xy}(f) = \tau_0 f 360^\circ ,$$

d.h., für $\tau_0(f) = \text{const.}$ ist das Phasenspektrum eine lineare Funktion der Frequenz, wobei die Steigung proportional zu τ_0 ist. Die zur Korrektur der Kohärenzschätzung notwendige Zeitverschiebung kann demnach aus der Steigung des Phasenspektrums ermittelt werden (vergl. Beispiel in Abschn. 8.5). Da $\hat{\phi}_{xy}(f)$ auf das Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ beschränkt ist, weist das geschätzte Phasenspektrum allerdings einen sägezahnförmigen Verlauf auf, sobald $\phi_{xy}(f)$ einen Wert außerhalb von $[-180^\circ, 180^\circ]$ besitzt (Abb. 20). Wird eine entsprechende Korrektur (also eine Verschiebung der Zeitreihen gegeneinander) durchgeführt dann muß beachtet werden, daß die so ermittelten Phasenwinkel $\hat{\phi}_{xy}^{\text{align}}(f)$ nicht mehr direkt interpretiert werden dürfen. Stattdessen müssen diese Winkel gemäß

$$\hat{\phi}_{xy}(f) = \hat{\phi}_{xy}^{\text{align}}(f) + \tau_0 f 360^\circ \pm n 360^\circ ,$$

umgerechnet werden, wobei der Faktor n dafür sorgt, daß das Ergebnis im Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ liegt.

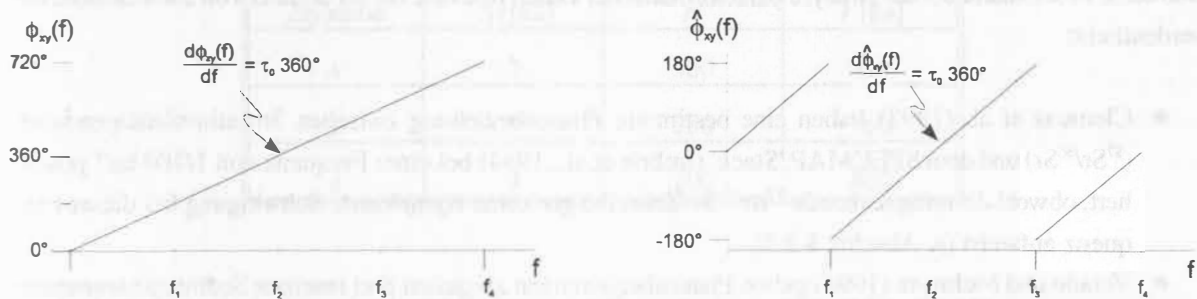


Abb. 20: Der tatsächliche Phasenwinkel, der bei einer zeitlichen Verschiebung um τ_0 zwischen zwei Zeitreihen auftritt (links) ist eine lineare Funktion der Frequenz. Aus der Steigung kann τ_0 bestimmt werden. Das geschätzte Phasenspektrum (rechts) ist dagegen unstetig — es weist einen sägezahnförmigen Verlauf auf. Aus den linearen Abschnitten läßt sich aber auch hier τ_0 abschätzen.

Die geschätzten Phasenwinkel können ebenfalls mit einem **systematischen Fehler** behaftet sein, für den gilt (vergl. Jenkins und Watts, 1968, S.400):

$$b[\hat{\phi}_{xy}] \propto n_{eff}^2 \left(\frac{d^2\phi}{df^2} + \frac{d\phi}{df} \frac{d}{df} \ln G_{xy}^2 \right) ,$$

5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

wobei die Frequenzabhängigkeit der Größen wiederum nicht mit dargestellt wurde. Besitzt ein Phasenspektrum eine ausgeprägte lineare Komponente ($d\phi/df \neq 0$) dann ist es wahrscheinlich, daß ein systematischer Fehler auftritt. Durch das beschriebene Verschieben der Zeitreihen gegeneinander ('alignment') kann dieser Fehler gleichzeitig mit dem systematischen Kohärenzfehler minimiert werden. In diesem Fall bewirkt die Unterdrückung der linearen Phasenkomponente nämlich, daß $d\phi/df$ gegen Null geht.

Wie bereits eingangs erwähnt wurde, geht es bei der Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen häufig darum, die Phasenbeziehungen zwischen *harmonischen* Signalkomponenten (Milanković Frequenzen) zu untersuchen. Die vorangegangene Diskussion macht folgende **Vorgehensweise** erforderlich:

1. Mit Hilfe der harmonischen Analyse (Abschn. 4) muß zunächst festgestellt werden, ob entsprechende harmonische Signalkomponenten überhaupt in *beiden* Zeitreihen vorhanden sind (Bedingung 1).
2. Wenn die erste Bedingung erfüllt ist, muß weiterhin überprüft werden, ob eine signifikante Kohärenz zwischen den harmonischen Signalen beider Zeitreihen besteht (Bedingung 2).
3. *Nur* wenn *beide* Bedingungen erfüllt sind, darf der bei den entsprechenden Frequenzen bestimmte Phasenwinkel als Schätzung für die Phasenbeziehung zwischen harmonischen Komponenten beider Zeitreihen angesehen werden. *Je nach Rauschanteil kann dieser Winkel allerdings stark fehlerbehaftet sein* (s. 8.4.2).

Daß diese Problematik bei der Analyse paläoklimatischer Daten relevant ist, sei anhand von zwei Beispielen verdeutlicht:

- Clemens et al. (1993) haben eine bestimmte Phasenbeziehung zwischen Strontiumisotopendaten ($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) und dem SPECMAP 'Stack' (Imbrie et al., 1984) bei einer Frequenz von $1/100 \text{ ka}^{-1}$ postuliert, obwohl die entsprechende $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zeitreihe gar keine *signifikante* Schwingung bei dieser Frequenz aufweist (s. Abschn. 8.3.2).
- Verado und McIntyre (1994) geben Phasenbeziehungen zwischen drei marinen Sedimentparametern (Kalziumkarbonat-, organischer Kohlenstoff- und Opalgehalt) und astronomischen Parametern bei einer Frequenz von $1/23 \text{ ka}^{-1}$ an, obwohl offensichtlich im Großteil der untersuchten Zeitreihen *kein* Varianzmaximum bei genau dieser Frequenz vorhanden ist (vergl. Tab. 4 mit Abb. 8 in Verado und McIntyre, 1994).

5.4 Hinweise zur Anwendung der BT- und LS-Methode

Wie bereits bei der Schätzung von Autospektren, kann die **BT-Methode** auch zur Schätzung von Kreuzspektren verwendet werden. Das Kreuzspektrum entspricht nämlich genau der Fourier-Transformation der Kreuzkorrelationsfunktion (z.B. Priestley, 1989, Kap. 9). Aus der Formulierung des Schätzers für die Kreuzkorrelationsfunktion (Gl. 6b) ergeben sich allerdings erhebliche Nachteile bei der Anwendung dieser Methode. Zur Schätzung dieser Funktion aus zwei Zeitreihen $x(t)$ und $y(t)$ muß nämlich folgende Bedingung erfüllt sein: $t_{xi} = t_{yi}$ für alle i . Nur wenn diese Bedingung erfüllt ist, kann die BT-Methode zur Kreuzspektralanalyse verwendet werden. Die im allgemeinen nicht äquidistanten 'geologischen' Zeitreihen müssen also vor einer Kreuzspektralanalyse auf eine identische Zeitachse gebracht werden. Die dazu notwendigen Interpolationen können allerdings zu deutlichen Fehlern bei Schätzung kreuzspektraler Größen führen (s. Abschn. 6.1). Als Vorgriff sei hier bereits erwähnt, daß eine interpolierte Zeitreihe auf keinen Fall mehr Datenpunkte als der Ausgangsdatensatz enthalten sollte, da andernfalls systematische Fehler bei der Bestimmung statistischer Kenngrößen auftreten. Dadurch wird die 'Freiheit' beim Interpolieren deutlich eingeschränkt, ein Effekt, der am folgenden Beispiel verdeutlicht werden soll. Es stehen drei nicht äquidistante Zeitreihen zur Verfügung, von denen einige Kenngrößen in Tabelle 4a zusammengefaßt sind. Aufgabe ist es, mit Hilfe der BT-Methode die Phasenbeziehungen zwischen allen Zeitreihen zu schätzen.

Tab. 4a: Kenngrößen von drei nicht äquidistanten Zeitreihen, wobei $t_{x1} = t_{y1} = t_{z1} = 0$ ka ist.

Zeitreihe	Δt [ka]	N	T [ka]
x	2	500	1000
y	3	250	750
z	4	200	800

Da die drei Zeitreihen unterschiedliche Zeitachsen aufweisen, ist es notwendig, sie gemäß den genannten Bedingungen zu interpolieren. Aus den in Tabelle 4b zusammengefaßten Kenngrößen der interpolierten Zeitreihen wird deutlich, daß insgesamt *vier* neue Datensätze mit unterschiedlichen Zeitintervallen bzw. Längen erzeugt werden müssen. Weiterhin ist zu beobachten, daß etwa die Hälfte der Datenpunkte aus der hochauflösenden Zeitreihe 1 gar nicht genutzt werden. Hierdurch tritt ein nicht zu vernachlässigender Informationsverlust auf.



5. Spektralanalyse bivariater stationärer Prozesse

Tab. 4b: Kenngrößen der interpolierten bzw. verkürzten äquidistanten Zeitreihen.

Phasenspektrum zwischen Zeitreihe	Δt_i [ka]	N	T [ka]	Bemerkungen
x und y	3	250	750	x : interpolieren; y : unverändert
x und z	4	200	800	x : verkürzen; z : unverändert
y und z	4	187	748	y : interpolieren; z : verkürzen

Werden kreuzspektrale Größen mit Hilfe der **LS-Methode** geschätzt, müssen die oben genannten Bedingungen *nicht* erfüllt sein und nicht äquidistante Zeitreihen können *direkt* verwendet werden. Zwei Zeitreihen können unterschiedlich lang sein und unterschiedliche Zeitintervalle zwischen den Beobachtungen aufweisen. (Zur Schätzung des Kreuz- und Kohärenzspektrums ist es nicht einmal erforderlich, daß sich die Zeitachsen der Zeitreihen überlappen (Scargle, 1989).)



6 Datenvorbereitung

In diesem Abschnitt werden verschiedene Maßnahmen zur Manipulation von Datensätzen beschrieben und erläutert, die vor einer Spektralanalyse durchgeführt werden können bzw. sollten. Einige dieser Verfahren sind notwendig, damit bestimmte Zeitreihen überhaupt den Voraussetzungen für eine Spektralanalyse genügen.

6.1 Interpolationsverfahren

Im folgenden sollen die bereits an mehreren Stellen erwähnten Nachteile der Interpolation nicht äquidistanter Zeitreihen näher erläutert werden. Obwohl die Verwendung der LS-Fourier-Transformation die Interpolation von Zeitreihen im Zusammenhang mit der Spektralanalyse eigentlich überflüssig macht, erscheinen diese Erläuterungen notwendig, da sich dadurch der entscheidende Nachteil der Blackman-Tukey-Methode, die sehr häufig zur Analyse paläoklimatischer Daten verwendet wird, verdeutlichen läßt.

Die zugrundeliegende Aufgabe bei einer Interpolation besteht darin, aus einer nicht äquidistanten Zeitreihe $x_{orig}(t_{orig}, i)$ [$i = 1, \dots, N_{orig}$] eine äquidistante Zeitreihe $x_{int}(t_{int}, i)$ [$i = 1, \dots, N_{int}$] zu erzeugen. Die interpolierte Zeitreihe soll dabei möglichst den 'gleichen Verlauf' besitzen wie die Ausgangszeitreihe. Da im allgemeinen gilt: $(t_{orig}, i) \neq (t_{int}, i)$, d.h., die interpolierten Zeiten unterscheiden sich in der Regel von den gemessenen Zeiten, besteht das mathematische Problem bei einer Interpolation darin, eine reelle und stetige Funktion $g(t)$ zu finden mit:

$$g(t_{orig}, i) = x(t_{orig}, i), \quad i = 0, \dots, N_{orig} - 1.$$

Diese **Interpolationsfunktion** erlaubt es dann, die zu interpolierenden Funktionswerte zu bestimmen:

$$g(t_{int}, i) = g(i \cdot \Delta t) = x(t_{int}, i), \quad i = 0, \dots, N_{int} - 1,$$

worin N_{int} die Anzahl der interpolierten Werte ist. Dieses impliziert, daß die Interpolationsfunktion genau durch die gemessenen Funktionswerte 'hindurchgeht'. Die folgenden beiden Grundregeln sollten bei der Interpolation von Zeitreihen immer berücksichtigt werden:

1. **Die Anzahl der Datenpunkte in der interpolierten Zeitreihe darf nicht größer sein, als die Anzahl der Punkte in der nicht äquidistanten Zeitreihe, also $N_{orig} \approx N_{int}$.** Dieses geschieht aus folgendem Grund: Die N_{orig} Datenpunkte einer Ausgangszeitreihe können (meistens) als voneinander unabhängige Beobachtungen (im statistischen Sinne) eines Prozesses angesehen werden. (NB: Die Forderung nach statistischer Unabhängigkeit der Daten bezieht sich nur auf die Messung [unkorrelierte Meßfehler], nicht jedoch auf den beobachteten Prozess selbst). Es seien $x(t_{orig}, 1)$ und $x(t_{orig}, 2)$ zwei benachbarte Datenpunkte der nicht äquidistanten Ausgangszeitreihe. Mit Hilfe der Interpolationsfunktion wäre es möglich, eine unendliche Anzahl 'neuer' Punkte zwischen diesen beiden Punkten zu berechnen. Die interpolierten

Punkte in dem Intervall sind jedoch nicht länger unabhängig voneinander, da sie von einer Funktion abhängen, die wiederum von den zwei gemessenen Punkten $x(t_{orig}, 1)$ und $x(t_{orig}, 2)$ abhängt. Da bei harmonischen Analysen und bei Tests auf eine signifikante Kohärenz die Anzahl der unabhängigen Meßwerte einen sehr starken Einfluß auf das Testergebnis hat, darf die Anzahl der interpolierten Datenpunkte nicht größer als die tatsächliche Anzahl unabhängiger Daten sein. Wird $N_{int} \gg N_{orig}$ gewählt, dann *erscheinen* nicht signifikante Testergebnisse regelmäßig als signifikant. Weiterhin ist zu beachten, daß im Falle $N_{int} \gg N_{orig}$ bei $T = const.$ der zeitliche Abstand zwischen den Punkten sinkt ($\Delta t_{int} < \overline{\Delta t}$). Gemäß Gleichung 2 steigt die Nyquist-Frequenz dadurch scheinbar an, obwohl gar keine Informationen oberhalb der ursprünglichen Nyquist-Frequenz in der Ausgangszeitreihe vorhanden sind. Obwohl daraus keine Fehler resultieren können, sollten Spektren nur bis zur tatsächlichen Nyquist-Frequenz dargestellt werden, um keine engere als die tatsächliche Beprobung vorzutäuschen.

2. **Der durch eine Interpolation bedingte Varianzverlust sollte möglichst klein sein.** Die Interpolation von nicht äquidistanten Zeitreihen geht in der Regel mit einem gewissen Varianzverlust einher, d.h. daß die Varianz der interpolierten Zeitreihe ($N_{orig} \approx N_{int} !$) kleiner ist als die der Ausgangszeitreihe. Dieser Varianzverlust sollte möglichst klein sein und 10-15 % (empirischer Richtwert) der Ausgangsvarianz nach Möglichkeit nicht überschreiten. Der Varianzverlust wirkt sich jedoch nicht auf alle Frequenzbereiche gleich aus, sondern geht mit einer **Abschwächung höherfrequenter Signalanteile** einher (s. unten.). Da es das Ziel der Auto- und Kreuzspektralanalyse ist, die in einer Zeitreihe enthaltene Varianz als Funktion der Frequenz zu untersuchen, muß mit systematischen Fehlern als Folge der Interpolation gerechnet werden (s. unten und Abb. 22).

Eine Interpolationsfunktion $g(t)$ kann sehr unterschiedliche Formen annehmen. Im einfachsten Fall, der **linearen Interpolation**, werden benachbarte Datenpunkte durch eine Gerade verbunden. Mit Hilfe der dazugehörigen Geradengleichung lassen sich dann die zu interpolierenden Punkte berechnen. In Abbildung 21a ist eine linear interpolierte Zeitreihe zusammen mit den nicht äquidistanten Datenpunkten der Ausgangszeitreihe dargestellt. Der Varianzverlust beträgt hierbei ca. 20 % (Tab. 5). Wie Abbildung 22b zeigt, ist dieser Varianzverlust im wesentlichen mit einer signifikanten Abschwächung der höherfrequenten Signalanteile verbunden. Die lineare Interpolation ist folglich ein sehr ungeeignetes Mittel, wenn diese Bereiche eines Autospektrums untersucht werden sollen.

Eine häufig verwendete Interpolationsmethode bilden die sog. **natürlichen kubischen Splines** (s. ausführliche Darstellung bei Engeln-Müllges und Reutter, 1991, Kap. 10). Die Interpolationsfunktion besteht aus intervallweise zusammengesetzten Polynomen dritten Grades, wobei die Teilintervalle so zusammentreffen, daß sie auf dem gesamten Intervall zweimal stetig differenzierbar sein müssen. Weiterhin wurde eine Randbedingung formuliert, wonach die zweite Ableitung der Spline-Funktion an ihren Enden Null sein muß. Abbildungen 21c und 21d zeigen eine Interpolation, die mit Hilfe einer natürlichen kubischen Spline-Funktion durchgeführt wurde. Deutlich erkennbar ist ein starkes '**Überschwingen**' der interpolierten Zeitreihe an zwei Stellen. Dieses führt dazu, daß die Varianz der interpolierten Zeitreihe deutlich größer ist als die Varianz der nicht äquidistanten Ausgangszeitreihe (Tab. 5). Dieses Verhalten ist typisch für diese Interpolationsmethode; es entsteht meistens dort, wo die erste Ableitung der zu interpolierenden Zeitreihe

besonders hoch ist. Da dieses Überspringen bei vielen paläoklimatischen Zeitreihen auftreten kann (die erste Ableitung steigt bei $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen z.B. regelmäßig während Eiszeiterminationen an [s. Abb. 29g]), eignen sich kubische Splines nicht für die vollautomatische Interpolation. Vielmehr ist eine zeitaufwendige, interaktive Interpolation erforderlich. Der Vorteil kubischer Splines liegt darin, daß relativ geringe Varianzverluste erzielt werden können (Abb. 22d). Besonders nachteilig wirken sich kubische Spline-Funktionen aus, wenn Probenlücken bzw. Hiaten in der Zeitreihe vorhanden sind. Im Bereich solcher Intervalle weist die Interpolationsfunktion häufig 'sinusförmige' Halbwellen auf. Ist die 'Periodendauer' dieser Halbwellen relativ lang, können signifikante Maxima im tieffrequenten Bereich eines Autospektrums entstehen, obwohl die Ausgangszeitreihe dort keine Varianz aufweist (Abb. 23b). Dieser Effekt wird manchmal als **spektrale Varianzverschiebung** bezeichnet.

Tab. 5: Resultate der Interpolation einer nicht äquidistanten Zeitreihe mit $N = 45$ Datenpunkten, Varianz $\sigma^2 = 1.88$ und einem durchschnittlichen Abtastintervall $\Delta t = 3.36$ (Einheiten werden nicht dargestellt). Die Interpolation erfolgte so, daß die Bedingung $N \approx N_i$ erfüllt ist. Die interpolierten Zeitreihen sind in Abbildung 21 dargestellt. Der Varianzgewinn bei der kubischen Spline-Interpolation kommt durch das im Text beschriebene 'Überspringen' zustande.

Interpolationsmethode	Anzahl der Punkte, N	Varianz	Varianzverlust, [%]
Linear	44	1.51	20
Fraktal	44	1.36	28
Kubischer Spline	44	60.5	-3220 !
Akima-Spline	44	1.77	6

Weit weniger bekannt sind die sog. **Akima-Subsplines** (Akima, 1970, 1991; Engeln-Müllges und Reutter, 1991, Kap. 13), bei denen es sich ebenfalls um intervallweise zusammengesetzte Polynome dritten Grades handelt. Im Unterschied zu den kubischen Splines wird allerdings nur eine einmalige, stetige Differenzierbarkeit verlangt. Abbildung 21e sowie Tabelle 5 zeigen, daß diese Interpolationsfunktion in der Wirkung ein Mittelmaß zwischen einer linearen- und einer kubischen Spline-Funktion darstellt. Der höherfrequente Varianzverlust ist allerdings auch hierbei erheblich (Abb. 22c). In Verbindung mit paläoklimatischen Zeitreihen würde ich dieser Interpolationsmethode den Vorzug einräumen, da sie einen ausgewogenen Kompromiß zwischen linearen Funktionen und kubischen Splines darstellt und ein Überspringen weitgehend ausgeschlossen werden kann. Beim Vorhandensein von Datenlücken zeigt diese Methode allerdings auch deutliche Schwachstellen (Abb. 23c)

6. Datenvorbereitung

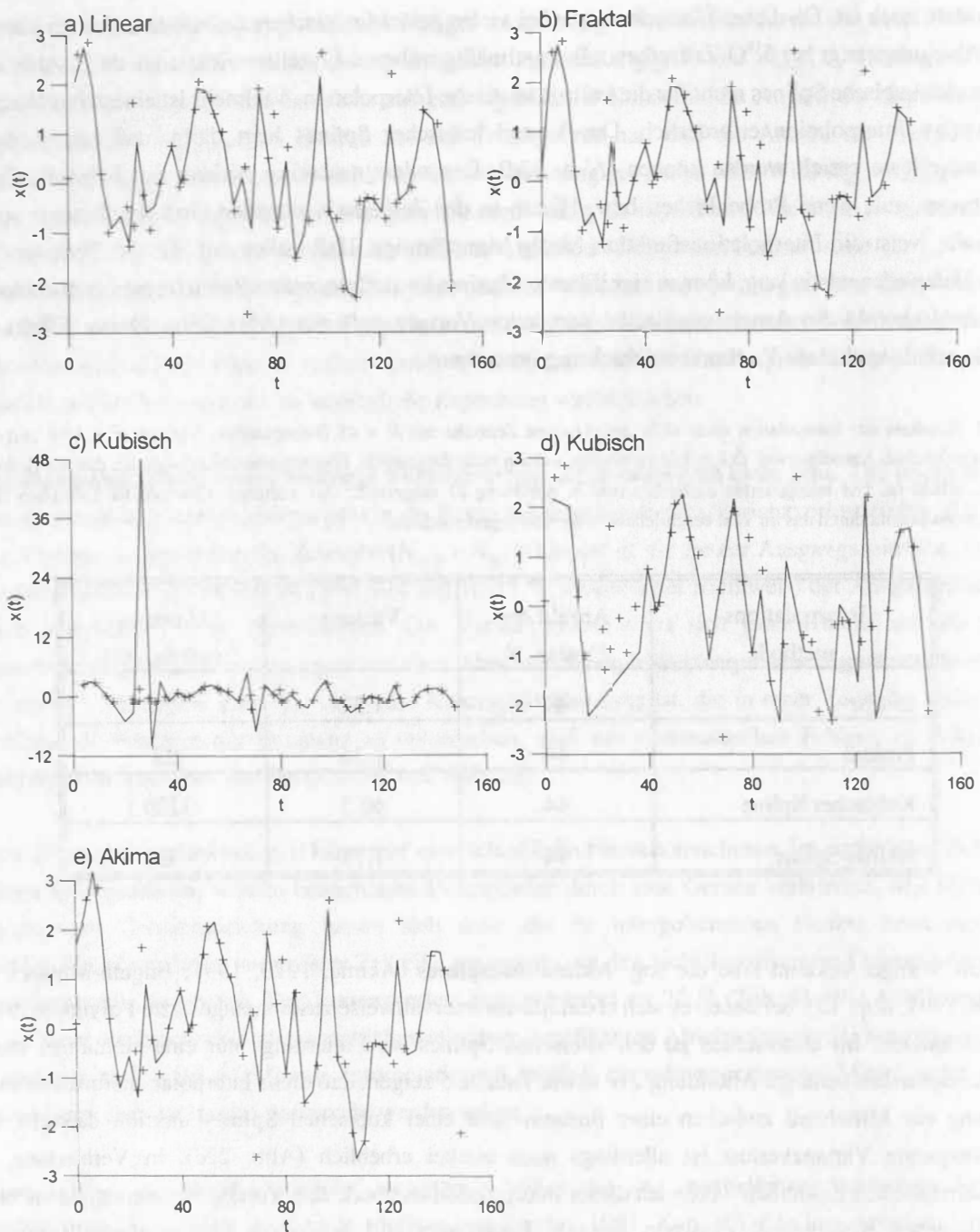


Abb. 21: Vergleich der verschiedenen Interpolationsverfahren. Die '+' markieren die nicht äquidistanten Punkte der Ausgangszeitreihe. Die Interpolationen (durchgezogene Linien) wurden so durchgeführt, daß die Anzahl der interpolierten Punkte gleich der Anzahl der Ausgangsdaten war. a) Lineare Interpolation, b) fraktale Interpolation (fraktale Dimension = 1.5), c) und d) kubische Spline Interpolation (NB: unterschiedliche Skaleneinteilung der Ordinaten) und e) Akima-Subspline Interpolation. Im Fall der kubischen Interpolation c) ist ein deutliches Überspringen erkennbar.

Rümelin (1990) hat eine Methode zur **fraktalen Interpolation** eindimensionaler, nicht äquidistanter Daten entwickelt, die zur Interpolation von Zeitreihen verwendet werden kann. Wird eine für marine, pleistozäne Zeitreihen auf kurzen Zeiskalen ($\Delta t_{int} < 20$ ka) typische fraktale Dimension (Schulz et al., 1994) zur Interpolation verwendet, dann ergeben sich allerdings ähnliche Resultate wie bei einer linearen Interpolation (Abb. 21b und Tab. 5). Der hohe Rechenaufwand fraktaler Interpolationen läßt die Verwendung dieser Methode - in diesem Zusammenhang - somit als nicht sinnvoll erscheinen.

Um die Nachvollziehbarkeit von Ergebnissen einer Spektralanalyse zu gewährleisten, sollten bei erfolgter Interpolation die folgenden Parameter immer angegeben werden: Interpolationsmethode, Anzahl der Datenpunkte (N_{orig} und N_{int}) und der Varianzverlust.

In diesem Abschnitt wurde verdeutlicht, daß die für die Anwendung der BT-Methode notwendigen Interpolationen zu ausgeprägten systematischen Fehlern bei der Spektralanalyse führen können. Beim Vorliegen nicht äquidistanter Daten sollte daher die LS-Fourier-Transformation zur Spektralanalyse verwendet werden.

6.2 Dezimierung

Für die LS-Fourier-Transformation werden ca. $100 N^2$ Rechenoperationen zur Transformation von N Datenpunkten benötigt (Press und Rybicki, 1989). Es soll beispielsweise eine Zeitreihe der Größe $N = 10000$ und $\Delta t = 5$ ka im Hinblick auf einen Frequenzbereich $< 1/30$ ka⁻¹ untersucht werden. Aus Gleichung 2 folgt, daß dafür eine Abtastintervall von lediglich 15 ka notwendig ist. Es wäre also möglich, aus der Zeitreihe nur jeden dritten Datenpunkt zu verwenden, d.h. die Zeitreihe auf einen Umfang $N_d = 3333$ zu dezimieren. Dieses würde eine neunfache Steigerung der Rechengeschwindigkeit mit sich bringen.

Diese Vorgehensweise ist allerdings nur dann sinnvoll, wenn keine Signalanteile oberhalb der durch die Dezimierung entstandenen Nyquist-Frequenz in der Zeitreihe vorhanden sind. Andernfalls würden diese durch den 'Aliasing'-Effekt (s. Abschn. 3.2.2) im Frequenzbereich unterhalb der 'neuen' Nyquist-Frequenz erscheinen. Da in der Regel vor einer Spektralanalyse nicht bekannt ist, ob entsprechende Signalanteile vorhanden sind, sollte von der Dezimierung nach Möglichkeit kein Gebrauch gemacht werden.

6. Datenvorbereitung

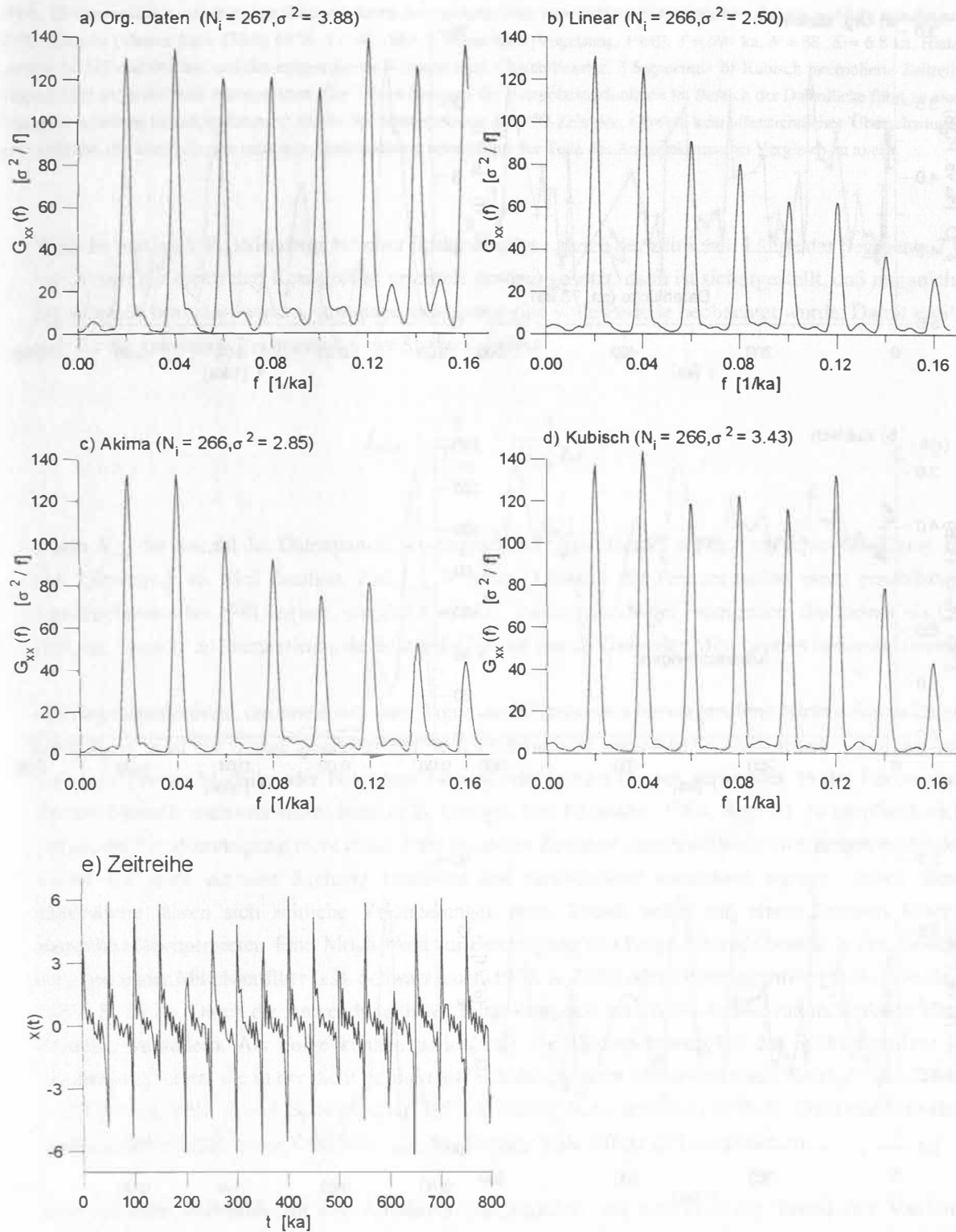
Abb. 22 (gegenüber): Abhängigkeit der geschätzten Autospektren vom verwendeten Interpolationsverfahren. Die nicht äquidistante Ausgangszeitreihe (e) besteht aus acht Sinusschwingungen gleicher Amplitude mit den Frequenzen $f = 0.02, 0.04, \dots, 0.16 \text{ ka}^{-1}$ ($T = 800 \text{ ka}$, $\overline{\Delta t} = 3 \text{ ka}$, $\text{Var}[\Delta t] = 1 \text{ ka}^2$). Sämtliche Interpolationen wurden so durchgeführt, daß die Anzahl der Punkte in den interpolierten Zeitreihen denen in der Ausgangszeitreihe entspricht ($N_i = 267$, $\Delta t_i = 3 \text{ ka}$). Die Autospektren wurden mit der LS-Methode unter Verwendung der WOSA-Segmentierung bestimmt (Hanning-Fenster, 3 Segmente). a) Spektrum der Ausgangszeitreihe (e); die leichten Schwankungen der Amplituden des Spektrums werden durch die nicht äquidistanten Daten hervorgerufen. Der kontinuierliche Anstieg der Minima zwischen den Hauptmaxima ist vermutlich auf spektrales Lecken zurückzuführen (σ^2 gibt die Varianz der Zeitreihe an). b) Autospektrum der linear interpolierten Zeitreihe. Der Varianzverlust bewirkt eine signifikante Verfälschung des tatsächlichen Spektrums im höherfrequenten Bereich. c) Die Akima-Splineinterpolation bewirkt ebenfalls eine markante Abschwächung der höherfrequenten Maxima. d) Mit der kubischen Splineinterpolation läßt sich der geringste Varianzverlust erzielen; die höherfrequenten Anteile des Spektrums wird weitgehend richtig geschätzt.

6.3 Tests auf Stationarität / Gegenmaßnahmen bei Nichtstationarität

Da die Annahme schwacher Stationarität für die Spektralanalyse von fundamentaler Bedeutung ist, sollte immer geprüft werden, ob eine Zeitreihe auch tatsächlich schwach stationär ist. Die Zeitunabhängigkeit des Mittelwertes kann mit einem 'Run'-Test (z.B. Bendat & Piersol, 1986, S. 95) oder einem 'Trend'-Test nach Cox und Stuart (z.B. Hartung, 1993, S. 247f) erfolgen. Unter einen zeitlichen **Trend** werden nicht periodische Veränderungen eines Parameters mit der Zeit verstanden. Im einfachsten Fall kann dies ein linearer Anstieg bzw. Abfall einer Größe (z.B. des Mittelwertes) entlang der Zeitachse sein (Granger und Hatanaka, 1964, S. 130). Die Zeitunabhängigkeit der Autokovarianzfunktion kann leicht überprüft werden, wenn folgender Umstand berücksichtigt wird: für $k = 0$ in Gleichung 4 ist $\gamma_{xx}(0) = \sigma_x^2$, also der Varianz des Intervalls. Da es unwahrscheinlich ist, daß sich die Autokovarianzfunktion ändert, ohne eine gleichzeitige Veränderung der Varianz zu bewirken (Bendat und Piersol, 1986, S. 343; Schwarzacher, 1975, S. 167), kann ein Varianztest nach Bartlett (z.B. Hartung, 1993, S. 617) zur Überprüfung der Zeitunabhängigkeit der Varianz herangezogen werden.

Paläoklimatische Zeitreihen sind in der Praxis fast nie stationär. Dafür ist in der Regel eine der drei folgenden Ursachen bzw. eine Kombination daraus verantwortlich:

1. Der **Mittelwert** einer Zeitreihe weist einen **Trend** auf. Ein Trend ist nach obiger Definition nichtperiodisch in der Zeit, was gleichbedeutend mit einer unendlich langen Periodendauer ist. Dementsprechend drückt sich ein Trend im tatsächlichen Autospektrum einer Zeitreihe durch ein lokales Maximum im Ursprung der Frequenzachse ($f = 0$) aus. Da bei der Schätzung eines Autospektrums die Frequenzachse jedoch in Intervalle der Breite Δf unterteilt wird, ist es nicht länger möglich, einen nicht periodischen Trend von periodischen Komponenten, deren Frequenzen kleiner als Δf sind, zu unterscheiden (Blackman und Tukey, 1958, S. 47f). Bedingt durch die 6 dB-Bandbreite und den Leckeffekt, verschlechtert sich die Situation noch weiter, da sich die effektive Breite der Frequenzintervalle entsprechend vergrößert. In der Praxis ist es daher nicht möglich, sehr niederfrequente Signalanteile von einem Trend des Mittelwertes zu unterscheiden.



6. Datenvorbereitung

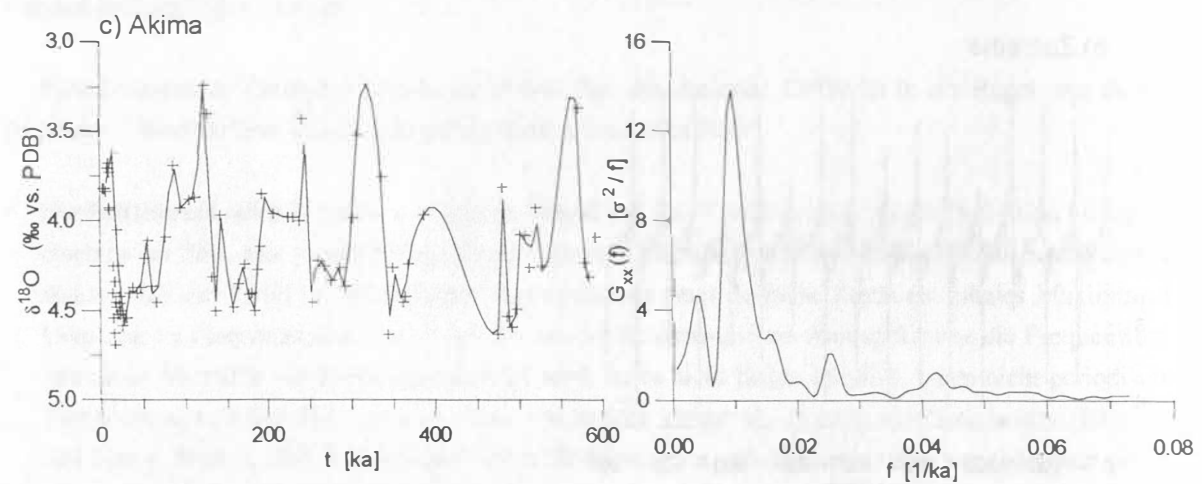
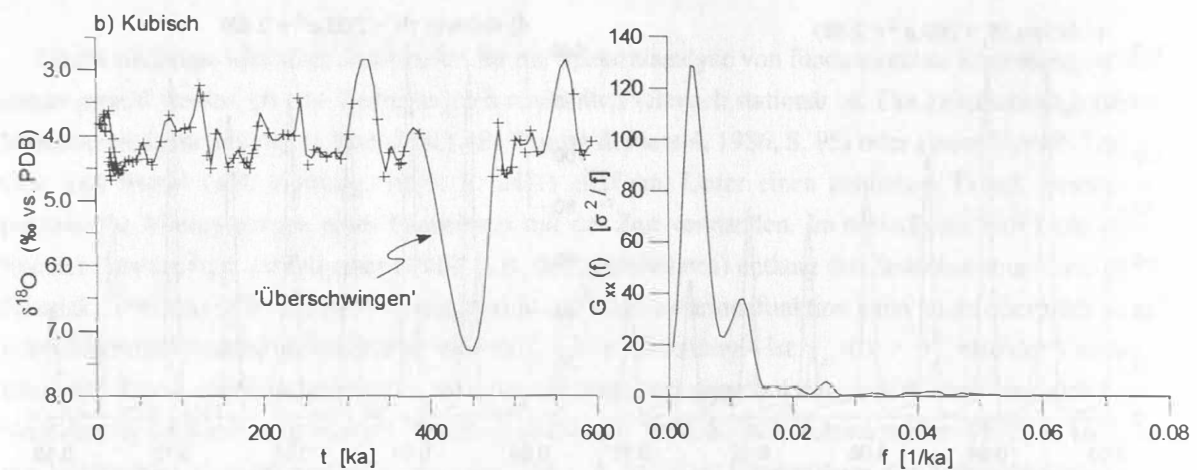
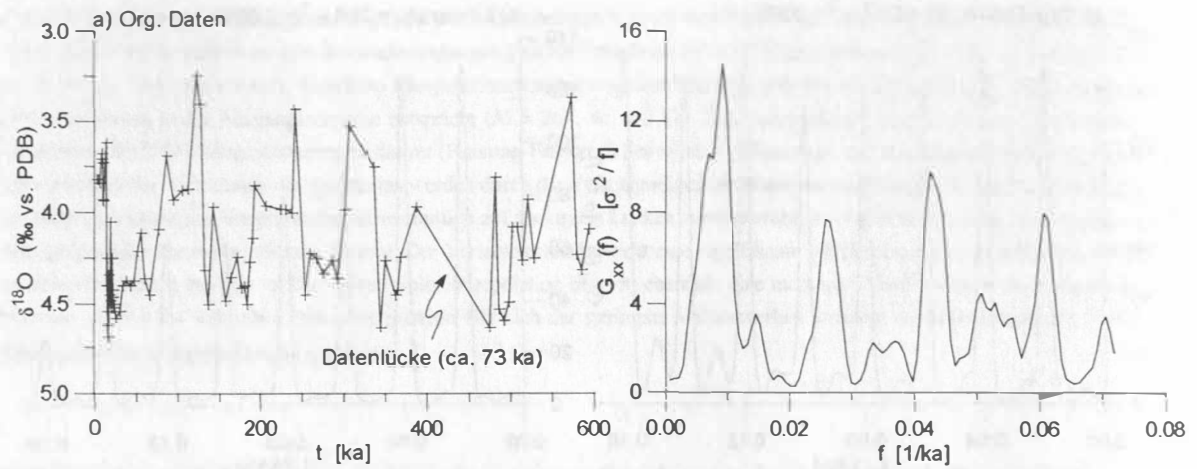


Abb. 23 (gegenüber): Abhängigkeit der geschätzten Autospektren vom verwendeten Interpolationsverfahren. a) Nicht äquidistante $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe (Meteor-Kern 23246; 69°N, 13°W; 1860 m Wassertiefe [Vogelsang, 1990], $T = 594$ ka, $N = 88$, $\Delta t = 6.8$ ka, Hiatus zwischen 387 und 461 ka) und das entsprechende Autospektrum (Welch-Fenster, 2 Segmente). b) Kubisch interpolierte Zeitreihe ($\Delta t = 6.8$ ka) und geschätztes Autospektrum. Das 'Überschwingen' der Interpolationsfunktion im Bereich der Datenlücke führt zu einer Varianzverschiebung im Autospektrum. c) Akima-Splineinterpolation der $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe. Obwohl kein offensichtliches 'Überschwingen' erkennbar ist, tritt ebenfalls eine markante Abschwächung höherfrequenter Teile des Autospektrums im Vergleich zu a) ein.

Wird die maximale Periodendauer bei einer Spektralanalyse gleich der zeitlichen Länge der Segmente T_{seg} (aus denen die spektralen Kenngrößen ermittelt werden) gesetzt, dann ist sichergestellt, daß nur solche Signalanteile betrachtet werden, von denen mindestens eine volle Periode beobachtet wurde. Damit ergibt sich für die **minimale Frequenz** bei der Spektralanalyse

$$f_{min} = \frac{1}{T_{seg}} = \frac{1}{N_{seg} \Delta t}, \quad (46)$$

worin N_{seg} die Anzahl der Datenpunkte pro Segment ist. Aus einem Vergleich zwischen Gleichung 13 und Gleichung 46 wird deutlich, daß $f_{min} > \Delta f$ ist. Obwohl die Frequenzachse eines geschätzten Autospektrums bei Null beginnt, empfiehlt es sich, Varianzanteile bei Frequenzen, die kleiner als f_{min} sind, mit Vorsicht zu interpretieren, da diese lediglich auf einem Trend des Mittelwertes basieren können.

Als **Gegenmaßnahme**, um eine durch einen Trend des Mittelwertes hervorgerufene Nichtstationarität zu beseitigen, wird der Trend geschätzt und anschließend von der Zeitreihe subtrahiert. Dazu werden meistens lineare Modelle oder Polynome zweiten oder dritten Grades verwendet. In der Praxis sind lineare Modelle meistens ausreichend (z.B. Granger und Hatanaka, 1964, Kap. 8). Es empfiehlt sich jedoch, die Trendbereinigung nicht anhand der gesamten Zeitreihe durchzuführen. Statt dessen sollte der Trend für jedes einzelne Segment bestimmt und anschließend subtrahiert werden. Durch diese Maßnahme lassen sich zeitliche Veränderungen eines Trends selbst mit einem linearen Modell ausreichend kompensieren. Eine Möglichkeit zur Bereinigung von Polynomtrends besteht in der Anwendung gleitender Mittelwertfilter (z.B. Schwarzacher, 1975, S. 227f) oder Differenzenfilter (z.B. Priestley, 1989, S. 597f). Durch die Anwendung dieser Filter kann sich jedoch die Autokovarianzfunktion einer Zeitreihe verändern. Als Folge können periodische Signalkomponenten bei der Spektralanalyse in Erscheinung treten, die in der nicht gefilterten Zeitreihe gar nicht vorhanden sind (Slutzky-Yule-Effekt [z.B. Hartung, 1993, S. 664; Schwarzacher, 1975, S. 229f]). Schwarzacher (1975, S. 299f) und Priestley (1989, S. 597) beschreiben Verfahren, um den Slutzky-Yule-Effekt zu kompensieren.

2. Eine zeitliche **Veränderung der Autokovarianzfunktion**, die sich in einem **Trend der Varianz** ausdrückt (s.o.). Verändert sich die in einem Prozeß enthaltene Varianz entlang der Zeitachse *unabhängig von der Frequenz*, wird die Form eines geschätzten Autospektrums sich nicht verändern. In diesem Fall werden sich lediglich die Amplituden der Autospektralwerte verändern, d.h. daß diese bei steigender Varianz größer bzw. bei verringerter Varianz kleiner werden (Granger und Hatanaka,

6. Datenvorbereitung

1964, S. 159).

Die zur konsistenten Schätzung spektraler Größen benutzte Mittelung von Rohspektren mehrerer Segmente (Abschn. 3.2) stellt eine wirksame **Gegenmaßnahme** dar, um einen Trend der Varianz zu kompensieren. Dieses gelingt natürlich umso effektiver, je mehr Segmente der Schätzung zugrunde liegen.

3. Eine zeitliche **Veränderung der Autokovarianzfunktion**, die sich in einer Veränderung der 'Form' des Autospektrums ausdrückt. In diesem Fall ändert sich die **frequenzabhängige** Varianzverteilung einer Zeitreihe (bzw. des beobachteten Prozesses) entlang der Zeitachse. Die Mittelung über mehrere Segmente stellt auch hierbei eine Kompensation für diese Form der Nichtstationarität dar. Gerade bei paläoklimatischen Fragestellungen ist aber diese Entwicklung eines Spektrums von Interesse, so daß eine entsprechende Mittelung gar nicht erwünscht ist. In Abschnitt 9 wird deshalb ein Verfahren beschrieben, das es erlaubt, die zeitliche Veränderung der frequenzabhängigen Varianzverteilung zu schätzen.

7 Das Programm SPECTRUM

7.1 Allgemeines

Im folgenden wird das Programm SPECTRUM (Version 1.09) vorgestellt, das speziell für die Spektralanalyse nicht äquidistanter paläoklimatischer Daten entwickelt wurde. Das Programm benötigt einen MS-DOS Computer und zeichnet sich unter anderem durch folgende Eigenschaften aus:

- Uni- und bivariate Spektralanalyse basierend auf der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation (Abschn. 3.3) in Verbindung mit der 'Welch-Overlapped-Segment-Averaging'-Methode (Abschn. 3.2).
- Harmonische Analyse: Testverfahren nach Fisher, Siegel und Scargle (s. Abschn. 4.1).
- Das Programm weist durch eine Vielzahl von Fehlermeldungen und Warnungen auf mögliche Fehler bei der Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen hin.
- Das Programm erlaubt die Messung von Phasenwinkeln, das Integrieren von Auto- und Kreuzspektren (zur Ermittlung von Varianzanteilen) und das Subtrahieren periodischer Signalkomponenten von Zeitreihen.
- Ergebnisse können als ASCII-Dateien abgespeichert werden und später wieder geladen werden.
- Daneben wurden Hilfsprogramme zur Bestimmung des durchschnittlichen Probenabstandes einer Zeitreihe und zur Überprüfung von Zeitreihendateien in das Programm integriert.
- SPECTRUM wurde in der Programmiersprache Turbo Pascal 6.0 geschrieben; zur Laufzeitminimierung wurde die Fourier-Transformation teilweise in Assembler programmiert.

Bevor SPECTRUM auf einem Computer installiert wird, sollte überprüft werden, ob die folgenden **Systemvoraussetzungen** erfüllt sind:

- mindestens ein 80386-Prozessor und ein mathematischer Coprozessor
- mindestens 580 kB freier Hauptspeicher
- ca. 1 MB EMS-Speicher (nicht XMS-Speicher!, eventuell muß die Option NOEMS des Befehls EMM386.EXE in der CONFIG.SYS gelöscht werden)
- ein VGA-Graphikadapter
- MS-DOS 5.0 oder höher (das Programm sollte auch mit älteren DOS-Versionen zusammenarbeiten, allerdings wurde dieses nicht getestet).

Das Programm kann per anonymen ftp über das Internet bezogen werden ([infosrv.rz.uni-kiel.de; /pub/sfb313/mschulz/spec109.zip](ftp://infosrv.rz.uni-kiel.de/pub/sfb313/mschulz/spec109.zip)). Zum Entpacken des Archivs ist das Programm 'PKUNZIP.EXE' erforderlich, das auf jedem SIMTEL-Server erhältlich ist. Die **Installation** des Programmes beginnt mit dem Erstellen eines Arbeitsverzeichnisses, z.B. 'C:\SPECTRUM'. Anschließend wird die Archivdatei hierhin entpackt: 'PKUNZIP -D SPEC109.ZIP C:\SPECTRUM'. Zum **Starten** des Programmes wechselt man in das Programmverzeichnis (z.B. C:\SPECTRUM) und ruft dort SPECTRUM.EXE auf. Sollte das Programm sich nicht starten lassen und stattdessen eine Fehlermeldung ausgeben, dann liegt dies in der Regel daran, daß nicht genügend Speicherplatz zur Verfügung steht. In diesem Fall sollten folgende Schritte durchgeführt werden:

7. Das Programm SPECTRUM

1. Mit dem DOS-Befehl MEM feststellen, wieviel konventioneller Speicher verfügbar ist. Auf die Angabe 'max. Größe für ausführbares Programm' achten. Es sollten mindestens 593920 Bytes angezeigt werden (entsprechen 580 kByte, da 1 kByte 1024 Byte sind).
2. SPECTRUM *nicht* in einem DOS-Fenster unter WINDOWS starten, sondern nur direkt unter DOS.
3. Eventuell Benutzeroberflächen wie XTREE oder Norton Commander ausschalten.
4. Mit dem DOS-Befehl MEMMAKER versuchen die Speicherbelegung zu optimieren. (Option Benutzerdefiniert, *nicht* für Windows optimieren).
5. Falls noch nicht genug Speicherplatz vorhanden ist, läßt sich mit dem DOS-Befehl 'MEM /C I MORE' feststellen, welche Programme sich im konventionellen Speicher befinden. Treiberprogramme (z.B. für Netzwerke), die in der AUTOEXEC.BAT geladen werden belegen häufig Speicherplatz, obwohl sie gar nicht ständig benötigt werden. Eine effektive Möglichkeit den Speicherplatz zu optimieren, besteht darin, diese Programme nur bei Bedarf zu laden. Entsprechende Hilfsprogramme und Erläuterungen dazu befinden sich im Unterverzeichnis .UTIL.
6. Falls es Probleme mit den griechischen Buchstaben und anderen Sonderzeichen gibt, sollten die Einstellungen in den Dateien CONFIG.SYS und AUTOEXEC.BAT (im Unterverzeichnis .START) mit den aktuellen Versionen verglichen werden.

Abschließend sollen noch einige Hinweise auf fremde, übernommene Algorithmen erfolgen: Die Fourier-Transformation basiert auf einer FORTRAN-Routine von Scargle (1989) und die Berechnung der Konfidenzintervalle für Kohärenzspektren wurde von Scannell und Carter (1978) ebenfalls als FORTRAN-Routine veröffentlicht. Das Laden von Dateien geschieht mit Hilfe der Unit SPECIAL (Liebtrau, 1989, S. 35ff). Die Routine zur Coprozessorerkennung stammt aus Schüller und Veddelar (1992, S. 652), die Overlay-Initialisierung und viele Tricks zur Tastaturabfrage entstammen dem Buch von Rubenking (1991, Kap. 9 und 10). Die sehr gute DOS-Shell wurde von Thomas Wagner (Ferrari Electronic GmbH, Berlin) entwickelt und ist als Freeware über das Internet erhältlich. Die Unit FMATH, die diverse arithmetische Funktionen unter Turbo Pascal zur Verfügung stellt, wurde von Kortemeyer et al. (1993, Kap. 3) entwickelt. Die automatische Achsenskalierung der Koordinatensysteme ist eine stark modifizierte Version eines von Fuhr (1991) vorgestellten Algorithmus. Diverse Standardroutinen zur Bestimmung von Quantilen einer χ^2 -Verteilung stammen aus Press et al. (1989).

7.2 Dateiformate

Dateien, die Zeitreihendaten enthalten, müssen zweispaltige ASCII-Dateien mit folgendem Aufbau sein:

```
# Kommentarzeile l
```

```
#
```

```
#
```

```
# Kommentarzeile m
```

```
t1 x1
```

```
t2 x2
```

```
tn xn
```

mit $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ und $n \leq 2500$ (maximale Anzahl der Datenpunkte). Die erste Spalte enthält also die Beobachtungszeiten und die zweite Spalte die Beobachtungswerte. Die Trennung der Spalten kann durch Leerzeichen oder TABs erfolgen. Bei der Angabe der Beobachtungszeiten ist zu beachten, daß t_n das höchste geologische Alter ist. Bei der Verwendung von Fließkommazahlen ist es wichtig, daß ein **Punkt als Dezimaltrennzeichen** verwendet wird und kein Komma (dieses gilt auch für alle Eingaben von der Tastatur). Dieses kann dann ein Problem darstellen, wenn die Ausgangsdaten mit der deutschen Version eines anderen Programms bearbeitet wurden (z.B. Tabellenkalkulation). Die Eingangsdaten können ebenfalls in Exponentialschreibweise vorliegen, wobei der Exponent maximal vierstellig sein darf (z.B. 1.2345E-0002). Kommentarzeilen werden durch ein '#' in der ersten (!!) Spalte des ASCII-Files gekennzeichnet und sind nur am Beginn eines Files erlaubt. Die maximale Zahl der Kommentarzeilen ist auf 20 beschränkt. Die Eingangsdateien können beliebige Namen und Endungen haben, allerdings ist es nicht ratsam, Endungen der Ausgangsdateien zu verwenden (s. Anhang).

Die Resultate einer Spektralanalyse werden ebenfalls als reine ASCII-Dateien abgespeichert werden. Um ein Wiedereinladen von Dateien zu ermöglichen, unterscheidet SPECTRUM die erzeugten Dateien anhand ihrer Endungen (extensions), die daher nicht verändert werden sollten. Grundsätzlich lassen sich zwei Arten von Ausgangsdateien unterscheiden:

1. Dateien, die zusätzlich zu den Resultaten einen Kopf enthalten, der die wesentlichen Analyseparameter beinhaltet (**Datendateien**);
2. Dateien, die speziell für die Übernahme in Graphikprogramme geeignet sind (**Plotdateien**).

Der genaue Aufbau dieser Dateien ist im Anhang beschrieben.

7. Das Programm SPECTRUM

7.3 Benutzung

SPECTRUM ist weitgehend menügesteuert. Zusätzlich wurde die Eingabe bestimmter Parameter an möglichst vielen Stellen durch vorgegebene Werte erleichtert. Abbildung 24 zeigt die gesamte Menüstruktur des Programms. Die Bedienung des Programms soll im folgenden schrittweise anhand von Beispielen demonstriert werden. Die dabei benutzten Beispieldateien befinden sich auf der Diskette im Unterverzeichnis \DEMO. Es werden folgende Kurzzeichen für verschiedene Tasten benutzt:

RET	Eingabetaste
ESC	Escape-Taste
CSL	Cursor nach links
CSR	Cursor nach rechts
CSUP	Cursor nach oben
CSDN	Cursor nach unten
POS1	Home- oder Position-1
END	Ende
F1	F1-Taste

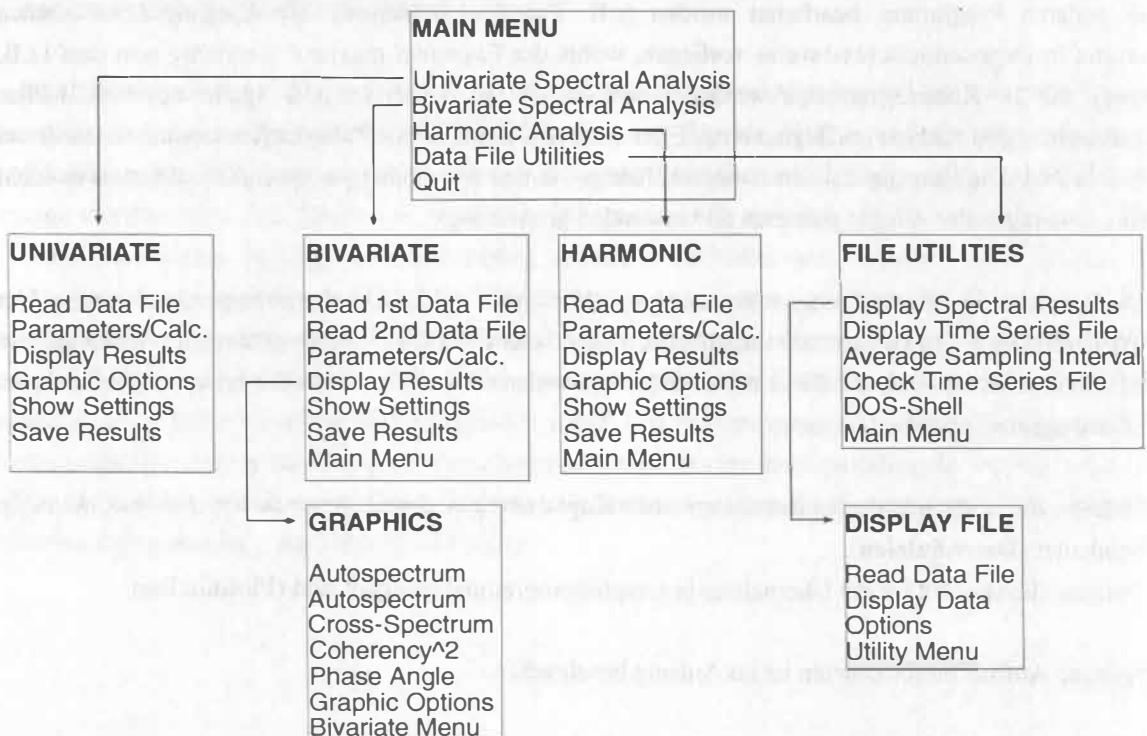


Abb. 24: Menüstruktur des Programmes SPECTRUM.

- Das Bewegen innerhalb eines Menüs erfolgt mit den CSUP und CSDN Tasten, die Wahl eines Menüpunktes erfolgt mit RET. Mit ESC gelangt man in das vorherige Menü zurück bzw. kann Grafiken wieder verlassen.
- Eckige Klammern [] enthalten voreingestellte Werte, die durch RET akzeptiert werden bzw. die Nummern von Auswahlmöglichkeiten ([1], [2],...), die durch die entsprechende Nummerntaste gewählt werden können.

7.3.1 Univariate Spektralanalyse

Nach dem Start des Programms erscheint ein Titelbild, das automatisch nach fünf Sekunden verschwindet (die Darstellung kann durch das Drücken einer beliebigen Taste vorzeitig abgebrochen werden). Anschließend erscheint das Hauptmenü auf dem Schirm, aus dem mit CSDN und RET das Untermenü 'Univariate' gewählt wird. Zunächst muß eine Datei mit Zeitreihendaten geladen werden (z.B. die Datei \DEMOXTEST.DAT von der Diskette). Nachdem '**Read Data File**' gewählt wurde erscheint ein Fenster zum Laden von Dateien auf dem Bildschirm. Innerhalb dieses Fensters kann man sich mit Hilfe der Pfeiltasten bewegen. Hervorgehobene Dateien bzw. Verzeichnisse (NAME\ oder ..\) werden durch RET gewählt. Zum Wechseln des logischen Laufwerkes auf z.B. Laufwerk A: wird STRG-A gedrückt. Nachdem die Datei XTEST.DAT gewählt wurde kann eine kurze Bezeichnung für den Datensatz eingegeben werden. Wird stattdessen RET gedrückt, wird das Kürzel 'X' vergeben.

Nach der Rückkehr in das Menü wird der Punkt '**Paramters/Calc.**' gewählt, um die zur Berechnung notwendigen Parameter festzulegen. Der 'oversampling factor' (**OFAC**) bestimmt die bei der LS-Fourier-Transformation mögliche Überbeprobung (s. Abschn. 3.3), d.h. je höher dieser Wert ist, desto mehr Frequenzen werden untersucht. Dadurch erhalten die geschätzten Spektren ein 'glatteres' Aussehen. Wie bereits in Abschnitt 3.3 erwähnt wurde, handelt es sich bei der Überbeprobung lediglich um eine Art Interpolation; die Anzahl der unabhängigen Frequenzen bleibt davon völlig unberührt. In der Praxis hat sich gezeigt, daß $OFAC = 4$ einen vernünftigen Kompromiß zwischen Rechenzeit und Glättung des Spektrums darstellt. Dieser Wert ist voreingestellt und kann durch RET gewählt werden. Anschließend wird der Faktor gewählt, der die höchste zu untersuchende Frequenz f_{max} im Spektrum festlegt (**HIFAC**). Dabei gilt $f_{max} = \overline{f_{Nyq}} \cdot HIFAC$. Der Wert $HIFAC = 1$ ist voreingestellt und wird für das Beispiel durch RET akzeptiert. Bei der Verwendung äquidistanter Zeitreihen sollte HIFAC niemals größer als eins gesetzt werden! Die weiteren Parameter sind weitgehend selbsterklärend:

Anzahl der Segmente:	3 (Anzahl der um 50 % überlappenden Segmente bei der WOSA-Methode)
Wahl eines Fensters:	3 (Hanning-Fenster)
Signifikanzniveau:	2 ($\alpha = 0.01$)
linearen Trend subtrahieren:	RET (ja)
logarithmische Skala:	RET (ja)
Milanković-Frequenzen markieren:	RET (ja)

7. Das Programm SPECTRUM

Einheiten der Zeitachse: RET (tausend Jahre [ka])
höchste darzustellende Frequenz: RET (höchste berechnete Frequenz)

Nach der darauf folgenden Berechnung werden die wichtigsten statistischen Parameter der Analyse angezeigt. Dabei sollte besonders der verlässliche Frequenzbereich beachtet werden. Nach der Rückkehr in das Untermenü 'Univariate' wird '**Display Results**' zum Betrachten des Autospektrums aufgerufen. Auf dem Graphikbildschirm bedeuten:

- die vertikalen gestrichelten Linien markieren die Milanković-Frequenzen;
- das Kreuz in der rechten, oberen Ecke gibt die 6 dB-Bandbreite (horizontale Linie) und das Konfidenzintervall (vertikale Linie) an;
- die Statuszeile am unteren Bildschirmrand zeigt das Kürzel des Datensatzes, die 6 dB-Bandbreite und das Signifikanzniveau an.

Durch Betätigung der 'f'-Taste erscheint eine weiße vertikale Linie, die zum **Vermessen der Frequenzachse** dient. Diese Markierung kann mit Hilfe der CSL, CSR, POS1 und END bewegt werden (mit F1 erhält man eine Zusammenfassung der Tastaturbelegung). Die Periodendauer, bei der sich die Markierung gerade befindet, wird in der rechten unteren Bildschirmecke angezeigt.

Um die **relativen Varianzanteile** bestimmter Abschnitte im Spektrum bestimmen zu können, wurde ein Hilfsmittel zum Integrieren von Autospektren implementiert, das innerhalb des Graphikbildschirmes durch Betätigen der 'i'-Taste gewählt werden kann. Die Gesamtfläche unterhalb eines Spektrums entspricht hierbei 100 %. Die waagerechte gestrichelte Linie markiert den durchschnittlichen Wert des Autospektrums und liefert eine grobe Schätzung einer angenommenen weißen Rauschkomponente. Wird zur Bestimmung von Varianzanteilen lokaler Maxima nur deren Fläche oberhalb dieses Niveaus berücksichtigt, dann lassen sich die relativen Varianzanteile harmonischer Signalkomponenten näherungsweise abschätzen (s. Beispiel in Abschn. 8.1.2). Die Wahl der Integrationsgrenzen erfolgt mit Hilfe einer vertikalen Linie, die genauso bewegt wird wie bei der Frequenzmessung (F1 für Hilfe). Im vorliegenden Beispiel:

- Wahl der linken Integrationsgrenze: Markierung zur Frequenz 0.0067 ka^{-1} ($T = 150 \text{ ka}$) bewegen und RET drücken.
- Wahl der rechten Integrationsgrenze: Markierung zur Frequenz 0.0139 ka^{-1} ($T = 71.7 \text{ ka}$) bewegen und RET drücken.
- Das Ergebnis erscheint in der rechten unteren Bildschirmecke: 21.5 % der Gesamtvarianz werden durch den gewählten Frequenzbereich erklärt.

Durch Betätigung der 'n'-Taste gelangt man anschließend wieder in das 'Univariate'-Menü (alternativ kann durch die 'f'-Taste die Frequenzmessung erneut aktiviert werden). Zur Veränderung der Graphikparameter werden, nach der Wahl von '**Display Options**', die folgenden Parameter festgelegt:

logarithmische Skala:	n (nein)
nur untere Fehlerbalken zeigen:	RET (ja)
Milanković-Frequenzen markieren:	RET (ja)
höchste darzustellende Frequenz:	2 (Milanković-Frequenz Bereich)
Signifikanzniveau ändern:	RET (nein)

Nach Rückkehr zum Graphik Bildschirm ('Display Results') wird das Autospektrum jetzt auf einer linearen Skala dargestellt. Da die Konfidenzintervalle in diesem Fall nicht länger unabhängig von der Frequenz sind, werden sie an allen lokalen Maxima gezeigt. Die horizontale Linie in der oberen linken Bildschirmcke markiert wiederum die 6 dB-Bandbreite. Um die Ergebnisse der Analyse zu speichern, wird nach der Rückkehr in das Menü (ESC) die Option '**Save Results**' gewählt:

File Type:	1 (Datendatei)
alte Kürzel verwenden:	RET (ja)
zusätzliche Informationen eingeben:	RET (nein)
Dateiname (ohne Endung!):	XTEST

Die Option '**Show Settings**' erlaubt es die wichtigsten Einstellungen auf dem Bildschirm anzuzeigen. Damit ist das Beispiel für eine univariate Spektralanalyse beendet, die Resultate wurden in der Datei XTEST.PX abgelegt. Durch nochmaliges Drücken von ESC gelangt man zurück in das Hauptmenü.

7.3.2 Harmonische Analyse

Mit SPECTRUM können die in Abschnitt 4.1 beschriebenen Tests zur harmonischen Analyse durchgeführt werden. Da es kein objektives Kriterium für die Wahl von k beim gruppierten Periodogrammtest gibt, wurde auf die Implementierung dieses Tests im Programm verzichtet.

Die Bedienung erfolgt weitgehend analog zu der im vorherigen Abschnitt beschriebenen univariaten Spektralanalyse. Nach dem Aufruf des entsprechenden Untermenüs ('Harmonic Analysis') und dem Laden einer Datei (hier soll wiederum XTEST.DAT verwendet werden) müssen die Analyseparameter festgelegt werden ('**Parameters/Calc.**')

OFAC:	RET (4.0)
HIFAC:	RET (1.0)

(NB: Die Wahl von Segmentzahl und Fenstertyp entfällt bei der harmonischen Analyse, da die Tests auf *einem* Periodogramm basieren.)

7. Das Programm SPECTRUM

Testtyp:	1 (Test nach Fisher/Siegel)
λ für Siegel-Test:	1 ($\lambda = 0.6$)
Signifikanzniveau:	1 ($\alpha = 0.01$)
linearen Trend subtrahieren:	RET (ja)
Milanković-Frequenzen markieren:	RET (ja)
Einheiten der Zeitachse:	RET (tausend Jahre [ka])
höchste darzustellende Frequenz:	RET (höchste berechnete Frequenz)

Die graphische Darstellung unterscheidet sich bei der harmonischen Analyse ('Display Results') nur wenig von der bei der univariaten Spektralanalyse. Die vertikalen Linien markieren wiederum die Milanković-Frequenzen, der horizontale Balken in der linken oberen Bildschirmcke zeigt die 6 dB-Bandbreite. Die obere horizontale Linie markiert das kritische Niveau für den Fisher-Test (g_f), während die untere Linie das entsprechende Niveau für den Siegel-Test angibt (g_s). In der Statuszeile werden zusätzlich die Teststatistik und der kritische Wert für den Test nach Siegel angegeben. (NB: Die Testergebnisse basieren nur auf der Anzahl unabhängiger Frequenzen und sind somit unabhängig von dem Faktor OFAC). Im vorliegenden Fall ist $T > t_{\lambda, \alpha}$ und somit wird die Nullhypothese (weißes Rauschen) verworfen. Periodogrammwerte, die sich oberhalb von g_s befinden (bei $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ und $f = 1/41 \text{ ka}^{-1}$) deuten demnach auf die Gegenwart harmonischer Signalanteile in der Zeitreihe bei diesen Frequenzen hin. Durch Drücken von F1 kann ein Hilfebildschirm aktiviert werden, der unter anderem die Bewertung der Testergebnisse erleichtert. Neben der Möglichkeit zur Frequenzmessung ('f-Taste') besteht eine zusätzliche Option zum **subtrahieren periodischer Signalanteile** aus der Ausgangszeitreihe. Diese Option basiert auf einer von Ferraz-Mello (1981) entwickelten Methode, die in Abschnitt 9.2.1 ausführlich erläutert wird. Die Subtraktion von periodischen Signalanteilen sollte benutzt werden, wenn der Verdacht besteht, daß bestimmte Periodogrammmaxima lediglich durch spektrales Lecken hervorgerufen werden (bei der harmonischen Analyse kann das Lecken nicht unterdrückt werden, da keine Fenster verwendet werden). In diesem Fall ist es sinnvoll, Signalanteile, die die höchsten Periodogrammwerte hervorrufen, aus der Zeitreihe zu entfernen und die harmonische Analyse mit den 'gefilterten' Daten zu wiederholen. Die Bedienung soll anhand des Scheitelwertes bei $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ des Beispieldatensatzes verdeutlicht werden:

- Nach Betätigen der 'r'-Taste erscheint eine Markierungslinie, die, wie bereits bei der Frequenzmessung beschrieben, bewegt werden kann.
- Die Markierungslinie zur Frequenz $1/100 \text{ ka}^{-1}$ bewegen und anschließend RET drücken um das Subtrahieren der Signalkomponenten mit dieser Frequenz auszulösen.
- Nach der erfolgten Subtraktion wird erneut eine harmonische Analyse durchgeführt (mit unveränderten Parametern) und das Ergebnis graphisch dargestellt.

Nach der Rückkehr in das Menü 'Harmonic' können die Graphikparameter nachträglich verändert werden ('Display Options') bzw. die Einstellungen angezeigt werden ('Show Settings'). Im Unterschied zur univariaten Spektralanalyse kann in diesem Fall auch die Art des Tests verändert werden (Fisher/Siegel bzw. Scargle). Das Abspeichern der Resultate geschieht genauso wie bei der univariaten Spektralanalyse. Wurden ein oder mehrere Signalanteile subtrahiert, kann der aktuelle Datensatz ebenfalls unter einem beliebigen Namen abgespeichert werden.

7.3.3 Bivariate Spektralanalyse

Nachdem im Hauptmenü der Menüpunkt 'Bivariate Analysis' gewählt wurde, erscheint das entsprechende Untermenü auf dem Bildschirm. Dieses Menü und auch die Bedienung des Programms bei der bivariaten Spektralanalyse ist in weiten Teilen identisch zur bereits beschriebenen univariaten Analyse. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß in diesem Fall zwei Zeitreihendateien geladen werden müssen. Außerdem ist es möglich, daß Vorzeichen der Beobachtungen einer Zeitreihe umzukehren, was besonders in Verbindung mit Phasenspektren teilweise notwendig ist (s. Abschn. 5.3). Die anschließende Parametereingabe erlaubt neben den bereits besprochenen Größen auch die Festlegung der zeitlichen Verschiebung für die 'Alignment'-Technik. Nach der anschließenden Berechnung der verschiedenen Spektren erfolgt eine Abfrage, die die Art der Bestimmung der Konfidenzintervalle für das Kohärenzspektrum festlegt:

Option für Konfidenzintervalle: RET (Konfidenzintervalle werden nur für Kohärenzwerte bestimmt, die größer als der kritische Wert sind [vergl. Abschn. 5.2])

Nach der Rückkehr in das Untermenü 'Bivariate' wird 'Display Results' gewählt, woraufhin ein weiteres Menü ('**Graphics**') erscheint, aus dem die entsprechenden graphischen Darstellungen der verschiedenen Spektren aufgerufen werden können und außerdem die Graphikparameter verändert werden können ('Display Options'). Auf die Beschreibung der Graphiken der beiden Autospektren wird hier verzichtet, da diese identisch zur univariaten Spektralanalyse sind (s.o.). Die graphische Darstellung von Kreuzspektren erfolgt ebenfalls weitgehend analog zu der der Autospektren, mit der Ausnahme, daß hierbei keine Konfidenzintervalle berechnet werden (vergl. Abschn. 5.1). Beim Kohärenzspektrum markiert die horizontale Linie den kritischen Wert der Kohärenz; das Niveau dieses Wertes ist wiederum unabhängig von dem Faktor OFAC. Kohärenzwerte unterhalb dieses Niveaus müssen als nicht signifikant angesehen werden.

Bei der graphischen Darstellung des Phasenspektrums werden zur besseren Übersichtlichkeit nur Konfidenzintervalle dargestellt, die kleiner als $\pm 50^\circ$ sind (Fehler in dieser Größenordnung schließen eine sinnvolle Interpretation in Zusammenhang mit paläoklimatischen Fragestellungen ohnehin aus). Konfidenzintervalle, die größer als $\pm 50^\circ$ sind, sind durch Kreise markiert. Durch Betätigung der 'p'-Taste kann eine Option zur **Messung von Phasenwinkeln** aktiviert werden. Nach dem Aufruf dieser Funktion erscheint eine weiße horizontale Linie in der Mitte des Bildschirms, die mit Hilfe der Tasten CSUP, CSDN und POSI bewegt werden kann (mit F1 erhält man eine Zusammenfassung der Tastaturbelegung). Der Phasenwinkel, bei dem sich die Markierung gerade befindet, wird in der rechten, unteren Bildschirmecke angezeigt. Die Bestimmung der '**Alignment**''-Zeitverschiebung wird durch Drücken der 'a'-Taste gestartet (F1 für Hilfefunktion). Analog zur Integration von Autospektren bewegt man die Markierung zunächst zur linken Grenze eines linearen Segmentes des Phasenspektrums und drückt dann RET. Nach der folgenden Festlegung der rechten Intervallgrenze wird die dem Verlauf des Phasenspektrums im gewählten Abschnitt entsprechende Zeitverschiebung in der unteren linken Bildschirmecke angezeigt. Die auf diese Weise ermittelten Werte können als 'Alignment-Parameter' nach Rückkehr in das 'Bivariate'-Menü unter 'Parameters/Calc.' (bei Beibehaltung der bereits gewählten Parameter) eingegeben werden. Die Funktion zur Messung der Periodendauer und ein Hilfetext (F1) stehen hier wie auch innerhalb aller übrigen Graphiken

7. Das Programm SPECTRUM

zur Verfügung. Das Abspeichern der Resultate geschieht nach Rückkehr in das Untermenü 'Bivariate' in der bereits beschriebenen Weise.

7.3.4 Utilities

Nach der Wahl von 'Data File Utilities' im Hauptmenü erscheint das Untermenü 'Utilities' auf dem Bildschirm, das die folgenden Hilfsmittel zur Verfügung stellt:

'Display Spectral Results': Option zum Laden und anschließender graphischer Darstellung abgespeicherter Ergebnisse von Spektralanalysen (Datendateien). SPECTRUM erkennt die jeweilige Art der Analyse an der Endung der Datendateien (.PX, .PY, .PXY, .CXY, .PHI) und an der ersten Zeile innerhalb dieser Dateien. Um Fehler zu vermeiden, sollten weder die Endungen noch die Informationen in den Köpfen der Dateien verändert werden. Plotdateien können nicht wieder geladen werden.

'Display Time Series File': Dient zur graphischen Darstellung einer Zeitreihendatei. Das Vorzeichen der Daten kann umgekehrt werden (z.B.: bei $\delta^{18}\text{O}$ -Daten).

'Average Sampling Interval': Nach dem Laden einer Zeitreihendatei wird die Differenz aus dem zeitlichen Abstand zwischen zwei Beobachtungen und dem durchschnittlichen Abstand ($\Delta t_i - \overline{\Delta t}$) graphisch dargestellt. Am unteren Bildschirmrand wird zusätzlich das durchschnittliche Zeitintervall und dessen Standardabweichung angezeigt. Es sei darauf hingewiesen, daß im Falle äquidistanter Daten lediglich eine horizontale Linie auf dem Bildschirm erscheint, da $\Delta t_i - \overline{\Delta t} = \text{const.} = 0$ ist.

'Check Time Series File': SPECTRUM erwartet, daß Zeitreihendateien einen monoton steigenden Zeitvektor besitzen (s. Abschn. 7.2). Mit Hilfe dieser Option sollten Dateien vor einer Spektralanalyse untersucht werden. Werden doppelt vorhandene Zeitwerte in einer Zeitreihe identifiziert, dann können die entsprechenden Beobachtungswerte durch ihren Mittelwert ersetzt werden. Auf eine Korrektur für eine fallende Zeitachse (d.h. $t_i > t_{i+1}$) wurde bewußt verzichtet, da es in solchen Fällen meistens angebracht ist, die entsprechende Datei noch einmal genauer zu überprüfen.

'DOS-Shell': Die Funktion erlaubt es, SPECTRUM zeitweise zu verlassen und auf die Ebene des Betriebssystems zu wechseln. Der gesamte Hauptspeicher wird dabei in den EMS-Speicher (wenn XMS ebenfalls vorhanden, dann dorthin) ausgelagert. Die Rückkehr zum Programm erfolgt durch die Eingabe von 'EXIT'.

8 Spektralanalyse anhand von Beispielen

In diesem Abschnitt werden die in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Techniken zur uni- und bivariaten Spektralanalyse anhand von künstlich generierten und paläoklimatischen Zeitreihen weiter erläutert. Sämtliche Berechnungen in diesem Abschnitt wurden mit dem Programm SPECTRUM durchgeführt und basieren auf der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation in Verbindung mit der 'Welch-Overlapped-Segment-Averaging'-Methode.

Vor Beginn einer univariaten Spektralanalyse sollte zunächst überprüft werden, ob es sich bei den Datenpunkten einer Zeitreihe tatsächlich um unabhängig voneinander gemessene Werte handelt. Weiterhin sollte die Anzahl der Punkte mindestens 100 bis 200 sein, um relativ zuverlässige Ergebnisse zu erzielen (z.B. Chatfield, 1984, S.164). Bei einer bivariaten Analyse müssen beide Zeitreihen diese Kriterien erfüllen. Außerdem sollten in diesem Fall beide Datensätze ungefähr denselben Beobachtungszeitraum umfassen und etwa gleichviele Datenpunkte besitzen, da bei der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation einige Größen (z.B. fundamentale Frequenz, Nyquist-Frequenz) aus dem Mittel beider (nicht äquidistanter) Zeitreihen ermittelt werden. Wenn beispielsweise $\overline{\Delta t_x} \ll \overline{\Delta t_y}$ ist, dann würden kreuzspektrale Größen bis zu einer maximalen Frequenz bestimmt werden, die eventuell weit oberhalb der durchschnittlichen Nyquist Frequenz der Zeitreihe $y(t)$ liegt. In diesem Fall kann es vorkommen, daß spektrale Größen für einen Frequenzbereich geschätzt werden, für den die Zeitreihe gar keine Informationen mehr enthält.

8.1 Autospektralanalyse künstlich generierter Zeitreihen

8.1.1 Autoregressiver Prozeß zweiter Ordnung

Gegeben seien $N = 1024$ äquidistante ($\Delta t = 1$) Realisationen des folgenden autoregressiven Prozesses zweiter Ordnung [AR(2)]:

$$x_t = 0.75 x_{t-1} - 0.5 x_{t-2} + \epsilon_t,$$

worin ϵ_t eine Zufallskomponente mit $\epsilon_t \sim N(0,1)$ ist. (Ein entsprechender Datensatz wurde von Percival und Walden (1993) veröffentlicht und kann über das Internet vom STATLIB-Server bezogen werden.) Zur Vereinfachung werden die Einheiten der Größen im folgenden nicht berücksichtigt. In den Abbildungen 25a-d sind die Schätzungen des Autospektrums des AR(2)-Prozesses für verschiedene Segmentgrößen gezeigt. Neben den Schätzungen ist auch das tatsächliche Autospektrum für diesen Prozeß dargestellt (Percival und Walden, 1993, S. 392). In Abbildung 25 ist die Auswirkung des Unsicherheitsprinzips deutlich erkennbar. Mit zunehmender Anzahl der Segmente verkleinert sich das Konfidenzintervall einer Schätzung; gleichzeitig steigt die 6 dB-Bandbreite jedoch deutlich an. Das Periodogramm (Abb. 25a) besitzt zwar die höchste Auflösung, aber die Varianz des geschätzten Autospektrums ist so hoch, daß keine verlässlichen Rückschlüsse auf das tatsächliche Autospektrum möglich sind. Eine Erhöhung der Anzahl der Segmente, d.h. eine zunehmende Glättung des Periodogramms (Abb. 25b) gibt den generellen Verlauf des tatsächlichen Spektrums zwar schon relativ gut wieder, die Varianz des geschätzten Spektrums ist aber immer noch erheblich, was sich in vielen lokalen Maxima und Minima der Schätzung ausdrückt. Die weitere

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Glättung des Periodogramms führt zunächst zu einer recht guten Schätzung des zugrundeliegenden Autospektrums (Abb. 25c) und im weiteren Verlauf zu einer 'Überglättung' (Abb. 25 d). Letzteres wird durch die große Bandbreite bewirkt, die eine Mittelung über ein zu großes Frequenzintervall nach sich zieht. Dadurch kommt es zu einer systematischen Überschätzung des wahren Autospektrums über einen Großteil der Frequenzachse.

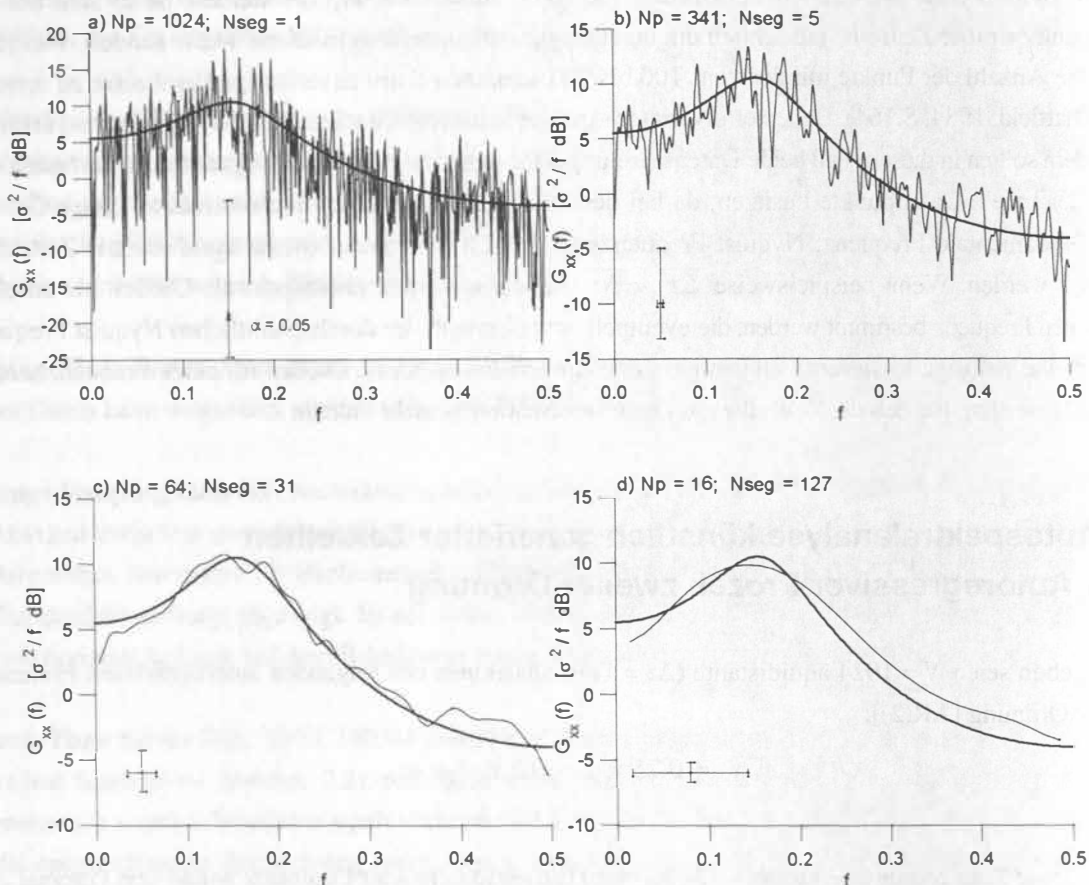


Abb. 25: WOSA-Autospektralschätzung für einen AR(2) Prozeß (dünne Linien). N_p gibt die Anzahl der Datenpunkte pro Segment an und N_{seg} ist die daraus resultierende Anzahl der Segmente. Bei allen Schätzungen wurde ein Hanning-Fenster zur Unterdrückung des Leckeffektes verwendet. Die waagerechten Balken in der linken unteren Ecke jedes Spektrums geben die 6 dB-Bandbreite, d.h. den ungefähren Abstand unkorrelierter Punkte entlang der Frequenzachse an. Die vertikalen Balken zeigen die Konfidenzintervalle für $\alpha = 0.05$ an (NB: logarithmische Ordinate). Weiterhin wurde OFAC = 4 gewählt (mit Ausnahme des Falles $N_{seg} = 1$ (Periodogramm), hier wurde zur besseren Übersichtlichkeit OFAC = 1 gesetzt). Die dicken Linien markieren das tatsächliche Autospektrum. Weitere Erläuterungen im Text.

Im vorliegenden Fall erhält man mit 31 Segmenten eine brauchbare Schätzung des zugrundeliegenden Autospektrums. Wäre das tatsächliche Autospektrum *nicht* bekannt gewesen, dann wäre es allerdings schwer zu entscheiden, ob die Schätzung in Abbildung 25d bereits eine 'Überglättung' darstellt oder nicht. Ein ähnliches Problem würde beim Übergang von Abbildung 25b nach 25c auftreten: Sind einige der Maxima (Abb. 25b) reale Bestandteile des tatsächlichen Autospektrums, oder werden diese ausschließlich durch die

mangelhafte Glättung des Periodogramms hervorgerufen und besitzen keinerlei physikalische Bedeutung? In Abschnitt 3.2.1 wurde das Prinzip des 'window closing' vorgestellt, um die notwendige Anzahl von Segmenten bei der Spektralanalyse abzuschätzen. Das vorliegende Beispiel macht deutlich, daß diese Wahl keineswegs eindeutig ist, sondern vielmehr einen weiten Spielraum läßt.

8.1.2 Varianzanteile harmonischer Signalkomponenten

In Abschnitt 3.1 wurde beschrieben, daß es mit Hilfe eines Autospektrums möglich ist, die in einer Zeitreihe enthaltene Varianz als Funktion der Frequenz darzustellen. In diesem Abschnitt werden die Varianzanteile harmonischer Komponenten in einer Zeitreihe mittels der Integrationsfunktion von SPECTRUM geschätzt. Dazu wird eine nicht äquidistante Zeitreihe erzeugt:

$$x_t = \sum_{i=1}^k A_i \sin(2\pi f_i t + \psi_i) + \epsilon_t, \quad (47)$$

mit $k=2$; $A_1=1.0$, $A_2=0.707$; $f_1=0.01 \text{ ka}^{-1}$, $f_2=0.024 \text{ ka}^{-1}$; $\psi_1=\psi_2=0$ und $\epsilon_t \sim N(0,2)$ (diese und alle weiteren normalverteilten Zufallszahlen wurden mit Hilfe der Routinen RAN3 und GASDEV [Press et al., 1989, Kap. 7] generiert). Weiterhin ist $T=801 \text{ ka}$ und $N=267$ und somit $\bar{\Delta t}=3.0 \text{ ka}$, wobei $\text{Var}[\Delta t]=1.0$ ist. Damit ergibt sich für die durchschnittliche Nyquist-Frequenz $\bar{f}_{Nyq}=0.17 \text{ ka}^{-1}$ (Gl. 2); Abbildung 26a zeigt die entsprechende Zeitreihe.

Für die **Varianz einer Sinusschwingung** gilt:

$$\sigma_s^2 = \frac{A_s^2}{2}, \quad (48)$$

worin A_s die Amplitude der Schwingung ist (z.B. Percival und Walden, 1993, S. 477). Damit ergeben sich für das vorliegende Beispiel folgende Varianzen der harmonischen Signalkomponenten: $\sigma_1^2 = 0.5$ und $\sigma_2^2 = 0.25$. Die Gesamtvarianz der Zeitreihe ist die Summe dieser beiden Varianzen und der Varianz der Zufallskomponente, d.h. $\sigma_G^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_\epsilon^2 = 2.75$. Die harmonischen Komponenten machen demnach 18 bzw. 9 % der Gesamtvarianz der Zeitreihe aus.

Abbildung 26b zeigt das geschätzte Autospektrum der Zeitreihe, wobei das Spektrum bis zur Nyquist-Frequenz ermittelt wurde ($\text{HIFAC}=1$). Beim Integrieren des Autospektrums, d.h. dem Messen von Varianzanteilen, stellt sich das Problem, welche Frequenzen ein lokales Maximum begrenzen. Da die Autospektralwerte der lokalen Maxima bei $f_1=0.01 \text{ ka}^{-1}$ und $f_2=0.024 \text{ ka}^{-1}$ sich jeweils aus der Summe der harmonischen Komponenten und der Zufallskomponente bei diesen Frequenzen zusammensetzen, würde die Ausnutzung der gesamten Fläche unterhalb der Maxima zu einer Überschätzung der harmonischen Varianzkomponente führen. Zur Korrektur dieses systematischen Fehlers müßte der zufällig bedingte

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Varianzanteil bei den entsprechenden Frequenzen bekannt sein, was in der Regel allerdings nicht der Fall ist. In der Praxis hat sich folgende Methode bewährt, um dieses Problem zu umgehen: Unter der Annahme, daß die Zufallskomponente normalverteilt ist (weißes Rauschen), kann die durchschnittliche Amplitude der Autospektralwerte (gestrichelte Linie in Abbildung 26b) als Maß für das Spektrum dieses Rauschens angesehen werden. Um relativ genaue Schätzungen von Varianzanteilen lokaler Maxima zu erhalten, werden die Schnittpunkte zwischen dem 'Rauschniveau' und der Autospektralfunktion beiderseits eines Maximums als Integrationsgrenzen gewählt. (Dieses Verfahren führt zu befriedigenden Ergebnissen, obwohl bei der Integration die gesamte Fläche zwischen den gewählten Integrationsgrenzen berücksichtigt wird - also auch unterhalb des 'Rauschniveaus'.) Im vorliegenden Beispiel wurden die relativen Varianzanteile auf diese Weise zu 17 bzw. 10 % bestimmt.

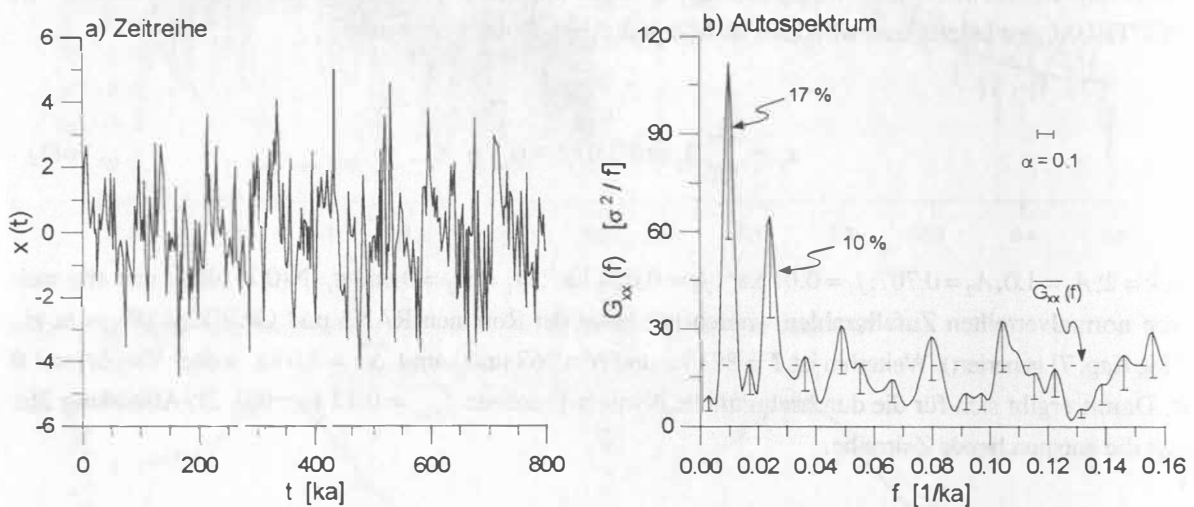


Abb. 26: Varianzverteilung eines Prozesses mit einem diskreten Spektrum (Gl. 47). a) Generierte nicht äquidistante Zeitreihe. b) Autospektralschätzung der in a) gezeigten Zeitreihe (Welch-Fenster, 5 Segmente, OFAC = 4, HIFAC = 1). Zur besseren Übersichtlichkeit wurden nur die negativen Konfidenzintervalle dargestellt ($\alpha = 0.1$). Der waagerechte Balken gibt die 6 dB-Bandbreite an. Die gestrichelte horizontale Linie markiert die durchschnittliche Amplitude aller ermittelten Autospektralwerte. Ebenfalls angegeben sind die geschätzten relativen Varianzanteile für die beiden harmonischen Signalkomponenten. Nähere Erläuterungen im Text.

Diese Vorgehensweise funktioniert umso besser, je weniger sich die durch harmonische Komponenten hervorgerufenen Maxima vom kontinuierlichen Hintergrundspektrum unterscheiden. In diesem Fall kommt es zu einer minimalen Beeinflussung der durchschnittlichen Amplitude durch einige 'hervorstechende' Maxima. Da die Gesamtfläche unterhalb des *berechneten* Spektrums gleich 100 % gesetzt wird, beziehen sich die relativen Varianzanteile immer auf das tatsächlich bestimmte Frequenzintervall. Da eine Zeitreihe Informationen über die Varianzverteilung (mindestens) bis zur Nyquist-Frequenz enthält, sollte (um leicht interpretierbare Ergebnisse zu erzielen) HIFAC = 1 gesetzt werden.

8.1.3 Arbeitsbereiche bei der Spektralanalyse

Die niedrigste Frequenz, bei der ein Autospektrum geschätzt wird, ist $f = \Delta f$; die höchste Frequenz ist in der Regel die Nyquist-Frequenz. In diesem Abschnitt werden diese Grenzen der Frequenzachse näher betrachtet. Dazu wird nach Gleichung 47 eine nicht äquidistante Zeitreihe mit folgenden Parametern erzeugt: $k=2$; $A_1 = A_2 = 1.0$; $f_1 = 1/400 \text{ ka}^{-1}$, $f_2 = 1/5 \text{ ka}^{-1}$; $\psi_1 = \psi_2 = 0$ und $\epsilon_t \sim N(0,2)$. Weiterhin ist $T = 998 \text{ ka}$ und $N = 318$ und somit $\overline{\Delta t} = 3.1 \text{ ka}$, wobei $\text{Var}[\Delta t] = 4.0$ ist. Damit ergibt sich für die durchschnittliche Nyquist-Frequenz $\overline{f_{\text{Nyq}}} = 0.16 \text{ ka}^{-1}$ (Gl. 2). Abbildung 27 zeigt die geschätzten Autospektren in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Segmente.

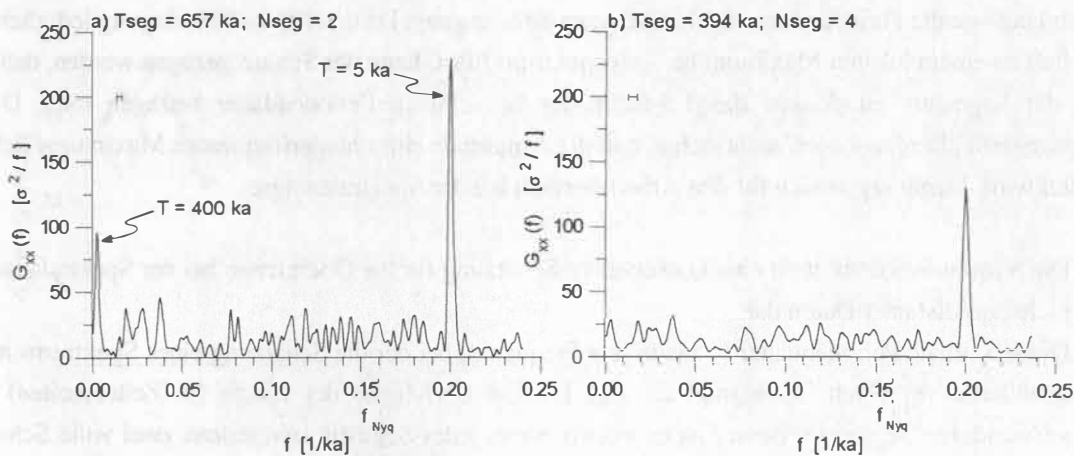


Abb. 27: Autospetren eines Prozesses mit einem diskreten Spektrum (Gl. 47). N_{seg} ist die Anzahl der Segmente, T_{seg} gibt die durchschnittliche Länge der Segmente an und f_{Nyq} markiert die durchschnittliche Nyquist-Frequenz. a) Die niederfrequente Signalkomponente führt zu einem lokalen Maximum im Spektrum, dessen Amplitude allerdings unterschätzt wird. Die Signalkomponente oberhalb der Nyquist-Frequenz wird einwandfrei wiedergegeben. b) Die höhere Zahl der Segmente hat zur Folge, daß jedes einzelne Segment ungefähr genauso lang wie die Periodendauer der niederfrequenten harmonischen Komponente ist, die nicht länger zu einem Maximum im Spektrum führt. Die Signalkomponente oberhalb der durchschnittlichen Nyquist-Frequenz wird auch weiterhin korrekt wiedergegeben. Zur besseren Übersichtlichkeit wurden Konfidenzintervalle nicht dargestellt. Die horizontalen Balken markieren die 6 dB-Bandbreite. Siehe Text für weitere Erläuterungen.

Unabhängig von der Anzahl der Segmente erzeugt die periodische Signalkomponente bei $f = 1/5 \text{ ka}^{-1}$ ein Maximum im Autospektrum. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß sich dieses Maximum oberhalb der durchschnittlichen Nyquist-Frequenz befindet und nur aufgrund der nicht äquidistanten Zeitreihe ermittelt werden konnte (s. Abschn. 3.3). Die unterschiedlichen Amplituden des Autosppektrums bei dieser Frequenz hängen mit den unterschiedlichen Bandbreiten zusammen. Das Maximum bei der Verwendung von vier Segmenten (Abb. 27a) ist breiter und niedriger als das bei der Verwendung von zwei Segmenten (Abb. 27b). Die Fläche unterhalb des Maximums bei der Frequenz $f = 1/5 \text{ ka}^{-1}$ ist dagegen in beiden Fällen gleich (vergl. Abb. 8). Eine quantitative Aussage über die höchste sinnvolle Frequenz bei der Anwendung der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation auf nicht äquidistante Zeireihen läßt sich nur schwer treffen. Je häufiger der zeitliche Abstand zwischen zwei Beobachtungen kleiner als das durchschnittliche Zeitintervall

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

ist, desto wahrscheinlicher ist es, daß eine Zeitreihe Informationen im Frequenzbereich oberhalb der durchschnittlichen Nyquist-Frequenz enthält.

Bei der Analyse niederfrequenter Signalanteile ergibt sich folgende Situation: Entgegen der Erwartung taucht ein Maximum bei einer Periodendauer von $T = 400$ ka lediglich im Fall von zwei Segmenten auf (Abb. 27). Weiterhin kann beobachtet werden, daß die Amplitude des Maximums bei dieser Frequenz niedriger als die Amplitude des Maximums bei $f = 1/5 \text{ ka}^{-1}$ ist, obwohl die Amplituden beider Signalkomponenten gleich groß sind. Die Ursache hierfür liegt in der Segmentierung der Ausgangszeitreihe. Im Falle von zwei Segmenten ergibt sich für die Länge jedes Segmentes $n_{50} \overline{\Delta t} = (2 \cdot 318/3) \cdot 3.1 \text{ ka} = 657 \text{ ka}$ lang, d.h. jedes der beiden Segmente besitzt ca. die 1.5 fache Länge der 400 ka-Schwingung. Wird die Anzahl der Segmente auf vier erhöht (Abb. 27b), ist jedes Segment nur noch ca. 394 ka lang und somit ungefähr genauso lang wie die Periodendauer der betrachteten Schwingung. Da die 400 ka Schwingung lediglich im ersten Fall zu einem lokalen Maximum im Autospektrum führt, kann der Schluß gezogen werden, daß die Länge der Segmente mindestens das 1.5-fache der betrachteten Periodendauer betragen muß. Diese Bedingung stellt allerdings noch nicht sicher, daß die Amplitude eines niederfrequenten Maximums richtig geschätzt wird. Damit ergibt sich für den Arbeitsbereich bei der Spektralanalyse:

- Die Nyquist-Frequenz stellt eine konservative Schätzung für die Obergrenze bei der Spektralanalyse nicht äquidistanter Daten dar.
- Die maximale Periodendauer (= niedrigste Frequenz), bei der die Schätzung eines Spektrums noch annähernd verläßlich ist, beträgt ca. das $1/1.5 = 0.67$ -fache der Länge (in Zeiteinheiten) der verwendeten Segmente. Besser ist es jedoch, wenn jedes Segment mindestens zwei volle Schwingungen einer bestimmten harmonischen Signalkomponente enthält (Horne und Baliunas, 1986).

8.1.4 Effekt eines linearen Trends

In Abschnitt 6.3 wurde bereits darauf hingewiesen, daß ein nicht periodischer Trend aufgrund der diskreten Frequenzachse eines geschätzten Autospektrums von niederfrequenten harmonischen Signalkomponenten nicht unterschieden werden kann. Diese Behauptung wird anhand des folgenden Beispiels demonstriert. Abbildung 28c zeigt eine nach Gleichung 47 generierte Zeitreihe, die harmonische Signalkomponenten bei den Frequenzen $1/100$, $1/41$ und $1/23 \text{ ka}^{-1}$ enthält. Die nicht äquidistante Zeitreihe besteht aus $N = 157$ Datenpunkten mit $T = 800 \text{ ka}$ ($\overline{\Delta t} = 5.0 \text{ ka}$). Zusätzlich enthält die Zeitreihe einen linearen Trend, der so gewählt wurde, daß die Zeitreihe mittelwertfrei ist. Abbildung 28a zeigt eine Schätzung des Autospektrums dieser Zeitreihe, wobei die Funktion zum Subtrahieren eines linearen Trends im Programm SPECTRUM ausgeschaltet war. Neben den Maxima, die durch die harmonischen Signalkomponenten hervorgerufen werden, erscheint ein weiteres Maximum bei einer Frequenz von ca. 0.0025 ka^{-1} ($T = 400 \text{ ka}$), das durch den Trend hervorgerufen wird. Die diskrete Frequenzachse und der spektrale Leckeffekt (der sich auch bei Verwendung eines Fensters nicht vollständig unterdrücken läßt) führen dazu, daß das durch den Trend bedingte Maximum bei der Frequenz $f = 0 \text{ ka}^{-1}$ sich auch in darüber liegenden Frequenzbereichen bemerkbar macht. Bei der Analyse paläoklimatischer Zeitreihen können die

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Auswirkungen eines linearen Trends leicht mit der niederfrequenten Exzentrizitätskomponente ($T = 404$ ka; Berger und Loutre [1991]) verwechselt werden.

Wird ein linearer Trend vor der Spektralanalyse von jedem Segment subtrahiert, dann erhält man das in Abbildung 28b dargestellte Ergebnis. Das durch den Trend hervorgerufene niederfrequente Maximum im Autospektrum ist nicht länger vorhanden. Um den Einfluß von möglichen Trendkomponenten einer Zeitreihe bei der Spektralanalyse zu unterdrücken, sollte immer eine lineare Trendbereinigung der Zeitreihe für die einzelnen Segmente erfolgen. Das Subtrahieren eines linearen Trends von einer Zeitreihe beinhaltet ebenfalls eine Mittelwertbereinigung, falls eine Zeitreihe einen von Null verschiedenen Mittelwert aufweist (der ebenfalls zu einem Maximum bei der Frequenz $f = 0$ in einem Autospektrum führt).

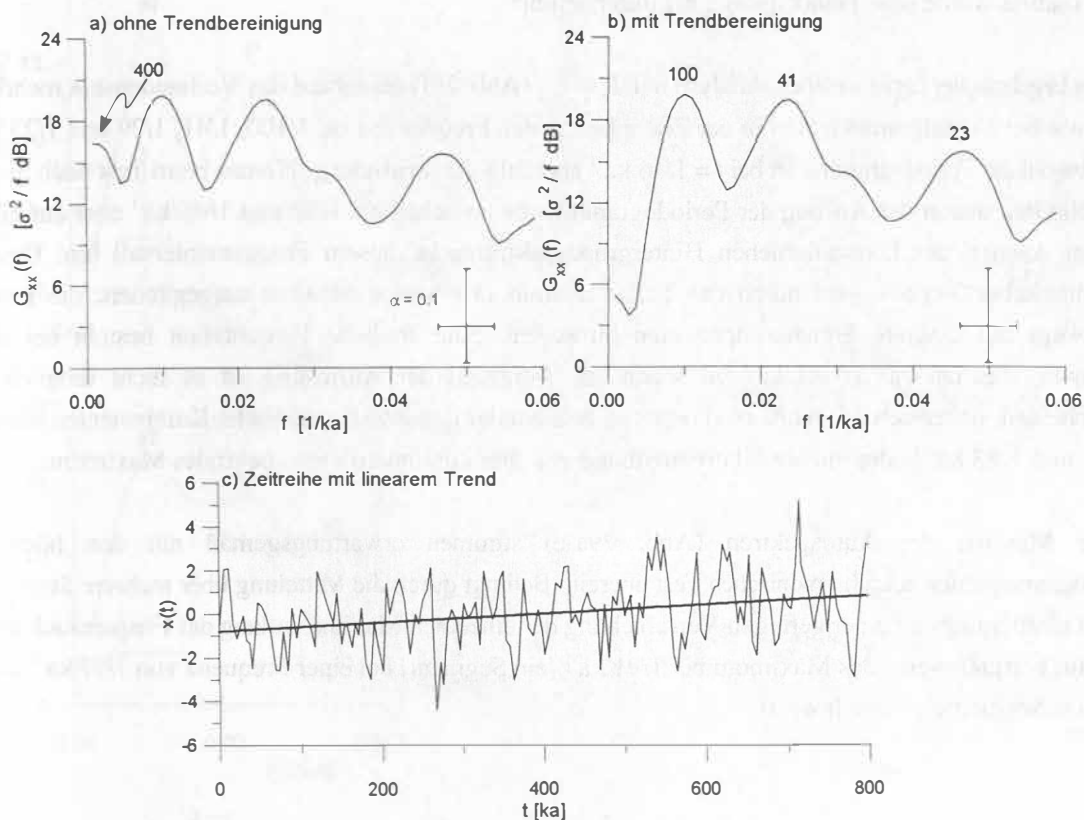


Abb. 28: c) Zeitreihe eines Prozesses mit einem diskreten Spektrum nach Gleichung 47 und einem überlagerten linearen Trend (dicke Linie). a) Autospektrum der Zeitreihe in c) bei ausgeschalteter Trendbereinigung (5 Segmente, Hanning-Fenster, OFAC = 4). Das Kreuz in der unteren rechten Ecke gibt die 6 dB-Bandbreite und das Konfidenzintervall für $\alpha = 0.1$ an. Das durch den Trend hervorgerufene niederfrequente Maximum im Autospektrum ist markiert. b) Autospektrum der Zeitreihe in c) mit den gleichen Parametern wie in a), allerdings mit eingeschalteter Trendbereinigung. (Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer [ka] an.)

8.2 Autospektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen

8.2.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Daten ODP Site 658

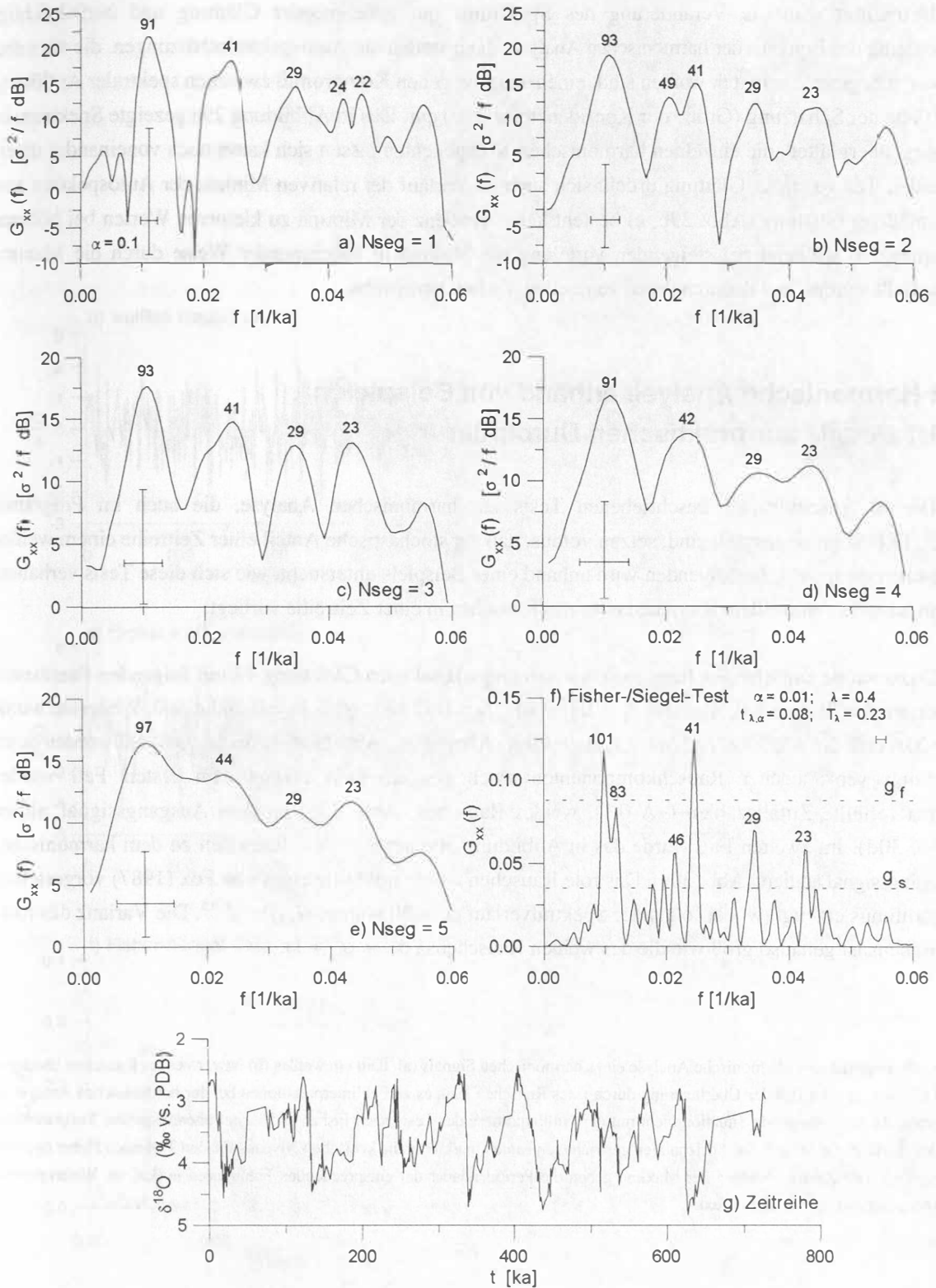
Die in Abbildung 29g gezeigte $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe wurde an benthischen Foraminiferen eines Tiefseekerns (ODP Site 658) gemessen, der im östlichen Nordatlantik (20° N , 18° W ; 2260 m Wassertiefe) erbohrt wurde (Tiedemann, 1991). Die Zeitreihe umfaßt $N = 404$ Datenpunkte mit einem durchschnittlichen Zeitintervall von $\overline{\Delta t} = 1.8 \text{ ka}$. Die hochauflösende Zeitreihe wird durch zwei Hiaten in den Zeitabschnitten 50-75 und 661-711 ka unterbrochen. Anhand dieser nicht äquidistanten Zeitreihe soll noch einmal das Unsicherheitsprinzip und die 'window-closing' Technik verdeutlicht werden (Abb. 29a-e). Um die Interpretation der Autospektren zu erleichtern, wurde weiterhin eine harmonische Analyse (Abb. 29f) durchgeführt. Vor jeder Analyse wurde eine Trendbereinigung durchgeführt.

Das Ergebnis der harmonischen Analyse mit $T_\lambda > t_{\lambda;\alpha}$ (Abb. 29f) deutet auf das Vorhandensein mehrerer harmonischer Signalkomponenten in der Zeitreihe mit den Frequenzen ca. $1/100$, $1/41$, $1/29$ und $1/23 \text{ ka}^{-1}$ hin. Obwohl der Periodogrammwert bei $f = 1/46 \text{ ka}^{-1}$ ebenfalls das kritische g_α Niveau beim Test nach Siegel überschreitet, deutet der Anstieg der Periodogrammwerte zwischen ca. $1/80$ und $1/46 \text{ ka}^{-1}$ eher auf einen stetigen Anstieg des kontinuierlichen Hintergrundspektrums in diesem Frequenzintervall hin. Dessen kontinuierlicher Verlauf wird durch das Periodogramm in einzelne Maxima aufgegliedert, die jedoch keineswegs auf diskrete Signalkomponenten hinweisen. Eine ähnliche Unsicherheit besteht bei dem Maximum, das bei ca. $1/100 \text{ ka}^{-1}$ zu sehen ist. Aufgrund der Auflösung ist es nicht möglich zu unterscheiden, ob es sich dabei um zwei sehr eng beieinander liegende harmonische Komponenten handelt ($1/101$ und $1/83 \text{ ka}^{-1}$) oder um ein relativ breitbandiges aber kontinuierliches spektrales Maximum.

Die Maxima der Autospektren (Abb. 29a-e) stimmen erwartungsgemäß mit den höchsten Periodogrammwerten beim harmonischen Test überein. Bedingt durch die Mittelung über mehrere Segmente kommt es allerdings zu einer geringen Verschiebung der einzelnen Maxima entlang der Frequenzachse (so erscheint beispielsweise das Maximum bei $1/91 \text{ ka}^{-1}$ [ein Segment] bei einer Frequenz von $1/97 \text{ ka}^{-1}$ wenn über fünf Segmente gemittelt wird).

Abb. 29 (gegenüber): Spektralanalyse der in g) abgebildeten $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe (ODP Site 658, [Tiedemann, 1991]). a) bis e) Autospektralschätzungen (Hanning-Fenster, OFAC = 4, $\alpha = 0.1$) der nicht äquidistanten Zeitreihe für eine unterschiedliche Anzahl von Segmenten (N_{seg}). (NB: logarithmische Ordinate: Autospektren sind nur für den Bereich der Milanković-Frequenzen gezeigt. Die Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an.) f) Harmonische Analyse der Zeitreihe mit Hilfe der Tests nach Fisher und Siegel ($\lambda = 0.4$; $\alpha = 0.01$; OFAC = 4, HIFAC = 0.5). Die horizontalen gestrichelten Linien markieren die kritischen Niveaus für den Test nach Fisher (g_f) bzw. Siegel (g_s). Das Testergebnis ($T_\lambda > t_{\lambda;\alpha}$) deutet auf die Gegenwart harmonischer Komponenten in der Zeitreihe hin. Siehe Text für weitergehende Erläuterungen.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen



8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Betrachtet man die Veränderung des Spektrums mit zunehmender Glättung und berücksichtigt gleichzeitig das Ergebnis der harmonischen Analyse, dann stellen die Autospektralschätzungen, die über drei bzw. vier Segmente gemittelt worden sind, einen ausgewogenen Kompromiß zwischen spektraler Auflösung und Güte der Schätzung (Größe der Konfidenzintervalle) dar. Das in Abbildung 29e gezeigte Spektrum ist bereits 'überglättet', die einzelnen harmonischen Komponenten lassen sich kaum noch voneinander unterscheiden. Die zu starke Glättung drückt sich auch im Verlauf der relativen Minima der Autospektren aus. Bei mäßiger Glättung (Abb. 29b, c) besteht keine Tendenz der Minima zu kleineren Werten bei höheren Frequenzen, während bei steigender Mittelung die Minima in zunehmender Weise durch die Maxima beeinflusst werden und dadurch deren generellen Verlauf annehmen.

8.3 Harmonische Analyse anhand von Beispielen

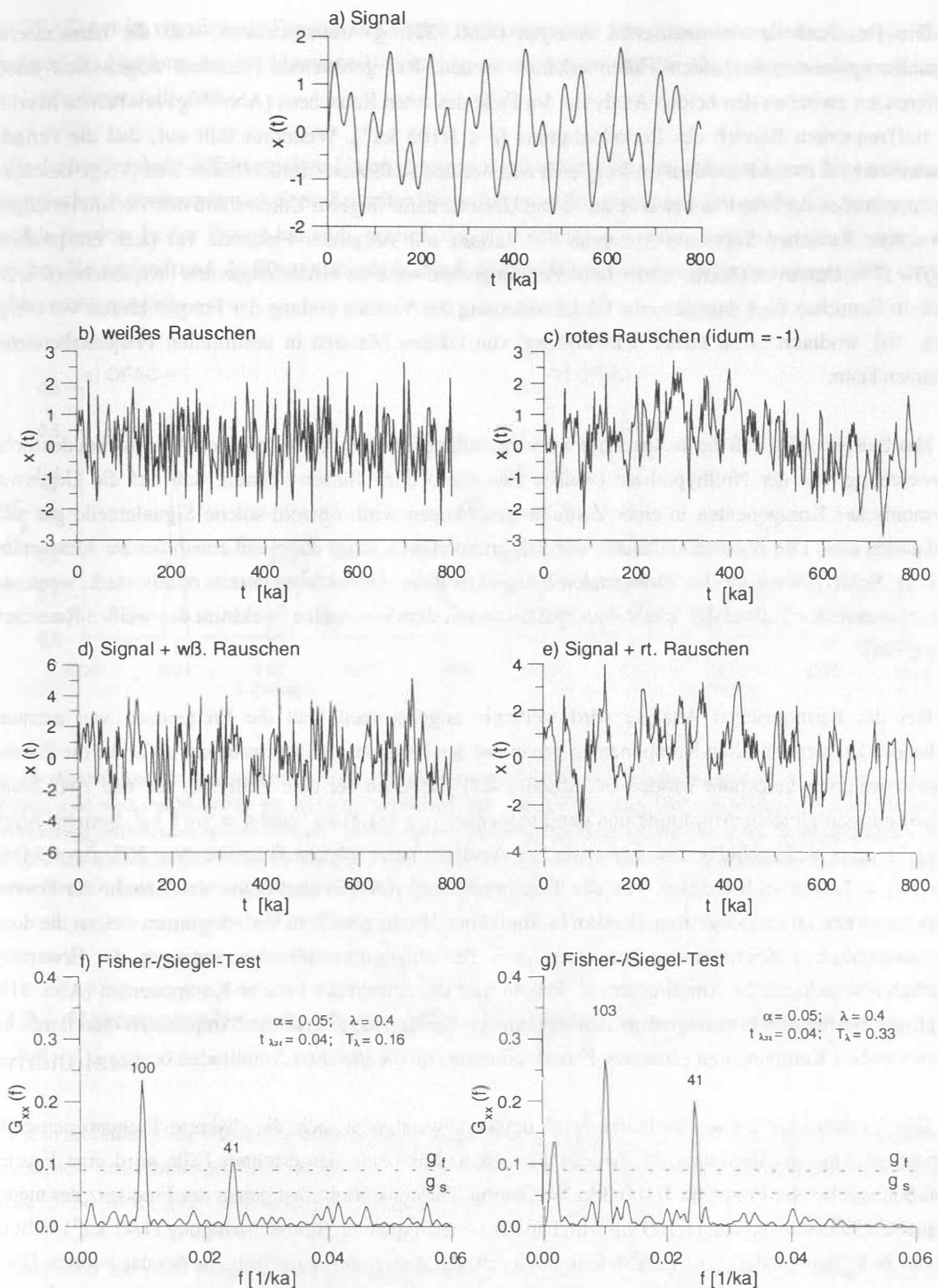
8.3.1 Details zur praktischen Durchführung

Die in Abschnitt 4.1 beschriebenen Tests zur harmonischen Analyse, die auch im Programm SPECTRUM implementiert sind, setzen voraus, daß der stochastische Anteil einer Zeitreihe einem weißen Rauschen entspricht. Im folgenden wird anhand eines Beispiels untersucht, wie sich diese Tests verhalten, wenn anstelle von weißem Rauschen ein rotes Rauschen in einer Zeitreihe vorliegt.

Dazu wurde zunächst ein harmonisches Ausgangssignal nach Gleichung 47 mit folgenden Parametern generiert: $k = 2$; $A_1 = 1.0$, $A_2 = 0.8$; $f_1 = 1/100 \text{ ka}^{-1}$, $f_2 = 1/41 \text{ ka}^{-1}$; $\psi_1 = \psi_2 = 0$ und $\epsilon_r = 0$. Weiterhin wurde $N = 316$ und $\overline{\Delta t} = 2.5 \text{ ka}$ $\text{Var}[\Delta t] = 1.0$ gewählt (Abb. 30a). Aus diesem Ausgangssignal wurden durch Addition verschiedener Rauschkomponenten zwei Testzeitreihen erzeugt. Im ersten Fall wurden normalverteilte Zufallszahlen ($\sim N(0,1)$), weißes Rauschen; Abb. 30b) zu dem Ausgangssignal addiert (Abb. 30d). Im zweiten Fall wurde das in Abbildung 30c gezeigte rote Rauschen zu dem harmonischen Ausgangssignal addiert (Abb. 30e). Das rote Rauschen wurde mit Hilfe eines von Fox (1987) vorgestellten Algorithmus erzeugt, wobei folgender Spektralverlauf gewählt wurde: $G_{\alpha}(f) \sim f^{-0.5}$. Die Varianz des roten Rauschens ist genauso groß wie die des weißen Rauschens ($\sigma_r^2 = \sigma_w^2 = 1$).

Abb. 30 (gegenüber): Harmonische Analyse eines harmonischen Signals (a), dem ein weißes (b) bzw. rotes (c) Rauschen überlagert wird (d) bzw. (e). Im Fall der Überlagerung durch rotes Rauschen kann es zu Fehlinterpretationen bei der harmonischen Analyse (g) kommen, da die vorliegende Situation nicht mit der Nullhypothese der Tests nach Fisher und Siegel übereinstimmt. Testparameter: $\lambda = 0.6$; $\alpha = 0.05$; OFAC = 4. Die horizontalen gestrichelten Linien markieren die kritischen Niveaus für den Test nach Fisher (g_f) bzw. Siegel (g_s). Die Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an. Weitergehende Erläuterungen befinden sich im Text.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen



8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Die Resultate der harmonischen Analyse (Abb. 30f, g) demonstrieren, daß die harmonischen Signalkomponenten in beiden Fällen erkannt werden. Bei genauerem Hinsehen zeigen sich jedoch Differenzen zwischen den beiden Analysen. Im Falle des roten Rauschens (Abb. 30g) erscheinen Maxima im tieffrequenten Bereich des Periodogramms ($f < 1/103 \text{ ka}^{-1}$). Weiterhin fällt auf, daß die Periodogrammwerte bei rotem Rauschen im Vergleich zum weißen Rauschen deutlich höher sind (vergl. besonders die Amplituden der Maxima bei $1/41 \text{ ka}^{-1}$). Die Ursache dafür liegt im Unterschied der Varianzverteilung. Bei rotem Rauschen liegt eine Abnahme der Varianz mit steigender Frequenz vor (z.B. entsprechend $G_{\text{ra}}(f) \sim f^{-0.5}$). Daraus resultieren relativ hohe Periodogrammwerte im niederfrequenten Frequenzbereich. Bei weißem Rauschen liegt dagegen eine Gleichverteilung der Varianz entlang der Frequenzachse vor (vergl. Abb. 4b), wodurch es zu keiner 'Überhöhung' von lokalen Maxima in bestimmten Frequenzbereichen kommen kann.

Das Beispiel zeigt, daß die in Abschnitt 4.1 vorgestellten Tests zur harmonischen Analyse bei deutlicher Abweichung von der Nullhypothese (weißes Rauschen) dazu führen können, daß auf die Gegenwart harmonischer Komponenten in einer Zeitreihe geschlossen wird, obwohl solche Signalanteile gar nicht vorhanden sind. Die Wahrscheinlichkeit der Fehlinterpretation steigt dabei mit zunehmender Abweichung von der Nullhypothese an (im vorliegenden Beispiel ist diese Abweichung bereits relativ stark, wenn man den exponentiellen Verlauf des 'roten' Autospektrums mit dem konstanten Spektrum des weißen Rauschens vergleicht).

Bei der harmonischen Analyse wird weiterhin angenommen, daß die Frequenzen von eventuell vorhandenen harmonischen Komponenten genau mit den Frequenzen übereinstimmen, für die die Fourier-Transformierten berechnet wurden (s. Abschn. 4.1). Gegeben sei eine Zeitreihe, die aus zwei Sinusschwingungen gleicher Amplitude und den Frequenzen $f_1 = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ und $f_2 = 1/41 \text{ ka}^{-1}$ besteht. Abbildung 31 zeigt die Ergebnisse von harmonischen Analysen einer solchen Zeitreihe ($N = 267$, $\overline{\Delta t} = 3.0 \text{ ka}$, $\text{Var}[\Delta t] = 1.0$) in Abhängigkeit von der 'Überbeprobung' (OFAC) und damit der Anzahl der Fourier-Transformierten im Periodogramm. Bei dem in Abbildung 31a dargestellten Periodogramm weisen die durch die harmonischen Komponenten hervorgerufenen Periodogrammamplituden, entgegen der Erwartung, deutlich unterschiedliche Amplituden auf. Erhöht man die Anzahl der Fourier-Komponenten (Abb. 31b), zeigt das ermittelte Periodogramm den erwarteten Verlauf, d.h., daß die Amplituden der durch die harmonischen Komponenten erzeugten Periodogrammwerte die gleichen Amplituden besitzen.

Die Ursache für dieses Verhalten wird deutlich, wenn man sich die diskrete Frequenzachse der Periodogramme in Abbildung 31 genauer betrachtet. Für beide dargestellten Fälle wird eine Fourier-Komponente bei der Frequenz $1/100.3 \text{ ka}^{-1}$ bestimmt. Dies entspricht fast genau der Frequenz der niederfrequenten Sinusschwingung ($1/100 \text{ ka}^{-1}$). Im Fall der höherfrequenten Sinusschwingung ($1/41 \text{ ka}^{-1}$) sieht die Situation dagegen anders aus. In Abbildung 31a sind die diskreten Frequenzen, die bei der Fourier-Transformation im entsprechenden Frequenzbereich entstehen, durch Punkte hervorgehoben. Da keine Fourier-Komponente genau bei der Frequenz der Sinusschwingung existiert, wird das entsprechende Maximum des Periodogramms auf mehrere Fourier-Transformierte verteilt dargestellt ('verschmiert'). Durch die Erhöhung der Überbeprobung (Abb. 31b) wird das Periodogramm bei einer größeren Anzahl von Frequenzen ermittelt.

Für $\text{OFAC} = 4$ ist die diskrete Frequenzachse des Periodogramms fein genug untergliedert, um ein 'Verschmieren' des Maximums bei der Frequenz $1/41 \text{ ka}^{-1}$ zu vermeiden, so daß das Maximum mit der erwarteten Amplitude dargestellt wird.

Da der beschriebene Effekt zu einer Unterschätzung bestimmter Maxima und damit zum Nichterkennen harmonischer Komponenten in einer Zeitreihe führen kann, sollte eine möglichst große 'Überbeprobung' gewählt werden. In der Praxis hat sich gezeigt, daß $4 \leq \text{OFAC} \leq 6$ einen ausgewogenen Kompromiß zwischen Rechenzeit und Auflösung darstellt. Noch höhere Werte bringen oftmals keine entscheidende Verbesserung mit sich.

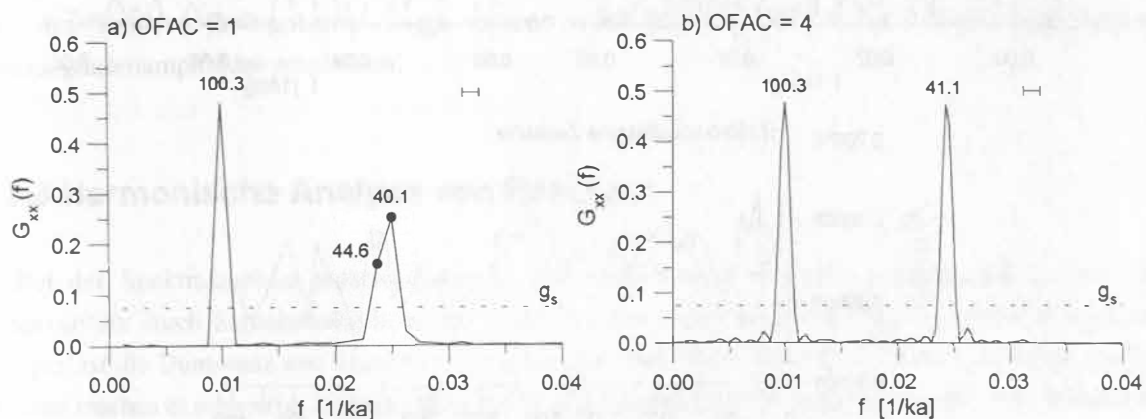


Abb. 31: Abhängigkeit der harmonischen Analyse von der diskreten Frequenzachse des Periodogramms. Durch die zu geringe Auflösung in a) wird das Maximum bei $1/41 \text{ ka}^{-1}$ 'verschmiert' und nicht mit der tatsächlichen Amplitude dargestellt. Wird die 'Überbeprobung' erhöht, dann erscheinen beide Maxima mit den erwarteten Periodogrammamplituden (b). Testparameter: $\lambda = 0.6$; $\alpha = 0.05$). Die horizontale gestrichelte Linie markiert die kritischen Niveaus für den Test nach Siegel (g_s). Die Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an.

8.3.2 Harmonische Analyse am Beispiel von Strontiumisotopenverhältnissen

Die in Abbildung 32c wiedergegebene Zeitreihe zeigt die Veränderung des an planktischen Foraminiferen gemessenen Strontiumisotopenverhältnisses ($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) für die letzten 452 ka (ODP Site 758; Indischer Ozean; 5°N , 90°E ; 2925 m Wassertiefe [Clemens et al., 1993]).

Basierend auf einer Kreuzspektralanalyse haben Clemens et al. (1993) aufgrund dieser Zeitreihe einen Synchronismus zwischen globalem Eisvolumen (SPECMAP-Stack, Imbrie et al., 1984) und der $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zusammensetzung des Meerwassers bei einer Frequenz von $1/100 \text{ ka}^{-1}$ postuliert. In Abschnitt 5.3 wurde bereits darauf hingewiesen, daß vor der Interpretation eines Phasenspektrums in Bezug auf harmonische Signalkomponenten zunächst festgestellt werden muß, ob entsprechende Komponenten überhaupt in beiden

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Zeitreihen vorhanden sind. Im folgenden wird, mit Hilfe einer harmonischen Analyse zu entscheiden, ob die $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zeitreihe eine harmonische Komponente mit der Frequenz $1/100 \text{ ka}^{-1}$ enthält.

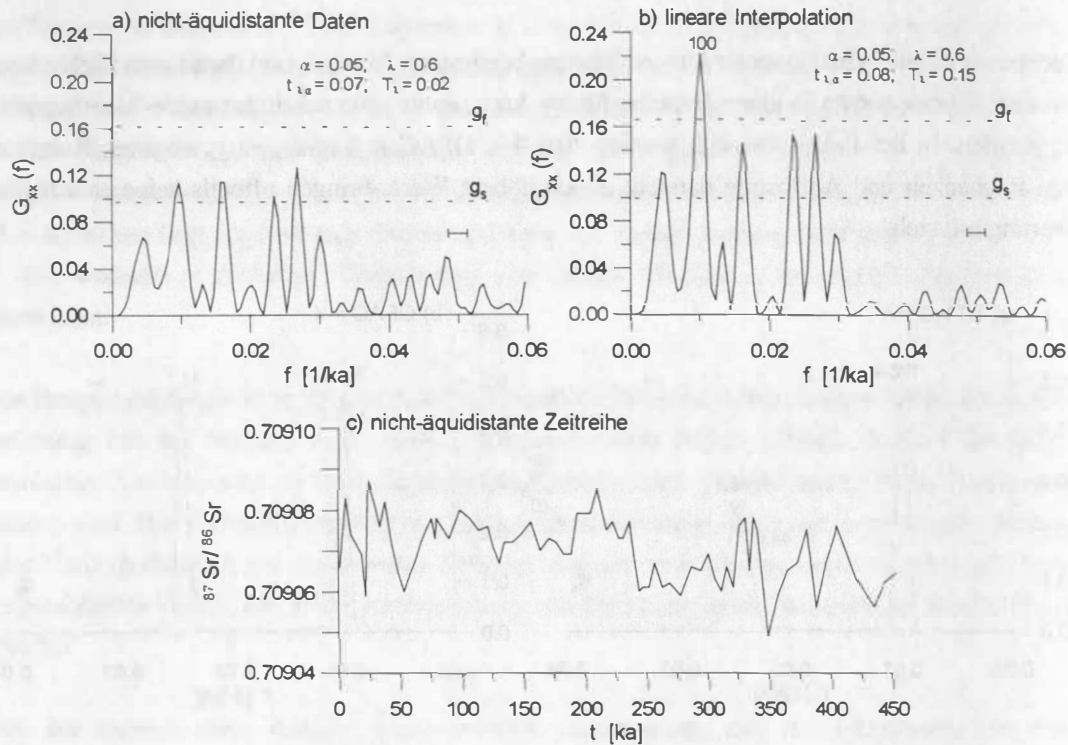


Abb. 32: c) $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ Daten von ODP Site 758 (Clemens et al., 1993). a) Harmonische Analyse der nicht äquidistanten Daten (Testparameter: $\lambda = 0.6$; $\alpha = 0.05$; OFAC = 4). Die horizontalen gestrichelten Linien markieren die kritischen Niveaus für den Test nach Siegel (g_f) bzw. Fisher (g_s). Die Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an. Obwohl einige Periodogrammwerte das kritische Niveau g_s übersteigen, kann die Nullhypothese (weißes Rauschen) wegen $t_{1-\alpha} > T_1$ nicht abgelehnt werden. b) Harmonische Analyse der linear interpolierten Zeitreihe unter Verwendung der gleichen Testparameter wie in a). Die Interpolation bewirkt eine Varianzverschiebung, die zur Ablehnung der Nullhypothese führt.

Die nicht äquidistante $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zeitreihe besteht aus 77 Datenpunkten, woraus sich ein durchschnittliches Zeitintervall von 5.9 ka ergibt. Damit liegt die Anzahl der Datenpunkte bereits deutlich unterhalb der empfohlenen Mindestanzahl von Beobachtungen für die Spektralanalyse (100-200; Chatfield [1984, S. 164]), so daß die Resultate sehr vorsichtig interpretiert werden sollten. Abbildung 32a zeigt das Ergebnis der harmonischen Analyse dieses Datensatzes (vor der Analyse wurde eine Trendbereinigung durchgeführt). Obwohl sich einige Periodogrammwerte oberhalb des kritischen Niveaus des Tests nach Siegel befinden, ergibt sich aus $T_\lambda < t_{1-\alpha}$, daß diese Maxima *nicht* durch eine oder zwei harmonische Komponenten hervorgerufen werden. Das Periodogramm läßt sich eher als farbiges Rauschen interpretieren, wobei das kontinuierliche Spektrum wiederum in Form einzelner Maxima und Minima erscheint, die jedoch keine physikalische Bedeutung besitzen (vergl. Abb. 30g). Da die $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zeitreihe kein Indiz für das Vorhandensein einer harmonischen Komponente liefert, muß die von Clemens et al. (1993) postulierte Phasenbeziehung zwischen globalem Eisvolumen und $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zusammensetzung des Meerwassers bei einer Frequenz von $1/100 \text{ ka}^{-1}$ angezweifelt werden.

Ein völlig anderes Bild ergibt sich allerdings, wenn die $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ -Zeitreihe linear interpoliert wird ($\Delta t = 6.0 \text{ ka}$, $N = 75$, Varianzverlust: 10 %). Das Resultat der harmonischen Analyse (Abb. 32b) deutet dann nämlich auf die Gegenwart einer oder mehrerer harmonischer Signalanteile in der Zeitreihe hin. Dieses Artefakt entsteht durch die Abschwächung höherfrequenter Signalanteile bei der linearen Interpolation. Aus Abbildung 22b ist ersichtlich, daß diese Abschwächung bereits bei einem Drittel der Nyquist-Frequenz einsetzt; im vorliegenden Beispiel also bei $f = 1/3 \cdot 1/(2 \cdot 6.0 \text{ ka}) = 0.028 \text{ ka}^{-1}$ und demnach im Bereich der Milanković-Frequenzen. Die lineare Interpolation bewirkt jedoch nicht nur eine Abschwächung höherfrequenter Signalanteile, sondern zusätzlich auch noch eine Varianzverschiebung. Im Fall der nicht äquidistanten Daten (Abb. 32a) werden ca. 62 % der Gesamtvarianz durch Frequenzen $< 0.0032 \text{ ka}^{-1}$ erklärt. Bei der linearen Interpolation steigt dieser Anteil auf ca. 85 % an, woraus die höheren Periodogrammamplituden resultieren.

8.3.3 Harmonische Analyse von Residuen

Bei der Spektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen kommt es häufig vor, daß ein Großteil der Datenvarianz durch Signalanteile in einem relativ kleinen Frequenzintervall erklärt wird. Ein typisches Beispiel ist die Dominanz von Maxima in Spektren bei einer Frequenz von ca. $1/100 \text{ ka}^{-1}$. Entsprechende Maxima machen es schwierig, Aussagen über die Restvarianz in einer Zeitreihe zu machen. Am Beispiel der am Vostok-Eiskern (78°S , 106°E) gemessenen Lufttemperatur wird eine Möglichkeit aufgezeigt, um die Residualvarianz zu untersuchen.

Aus dem Deuteriumgehalt des Eises kann die Lufttemperatur oberhalb der Inversionsschicht in der östlichen Antarktis geschätzt werden (Jouzel et al., 1993). Abbildung 33a zeigt die entsprechende Temperaturzeitreihe für die letzten 221 ka ($N = 1269$, $\Delta t = 0.175 \text{ ka}$). Die harmonische Analyse (Abb. 33c) zeigt, daß ein Großteil der Datenvarianz durch Signalanteile mit Frequenzen $< 0.05 \text{ ka}^{-1}$ erklärt werden kann. Obwohl die hohe Auflösung der Zeitreihe es ermöglichen würde, auch Frequenzbereiche oberhalb dieses Frequenzintervalls zu untersuchen, ist diese Möglichkeit durch die Dominanz der niederfrequenten Maxima in diesem Beispiel stark eingeschränkt, da diese Maxima eventuell vorhandene harmonische Signalanteile bei höheren Frequenzen 'verdecken'.

Subtrahiert man mit Hilfe der Subtraktionsfunktion im Programm SPECTRUM alle harmonischen Signalkomponenten mit Frequenzen $< 0.05 \text{ ka}^{-1}$, dann erhält man die in Abbildung 33b gezeigte Zeitreihe der Residuen. Die Varianz der Residuen beträgt ca. 5 % der Gesamtvarianz der Temperaturdaten. Die Residuen zeigen ausgeprägte periodische Schwankungen, die mit einer harmonischen Analyse weiter untersucht werden. Das Ergebnis dieser Analyse (Abb. 33d) macht deutlich, daß Residuen durch harmonische Schwingungen mit Periodendauern von 15.7 und 11.9 ka dominiert werden und keineswegs ein Rauschen darstellen.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

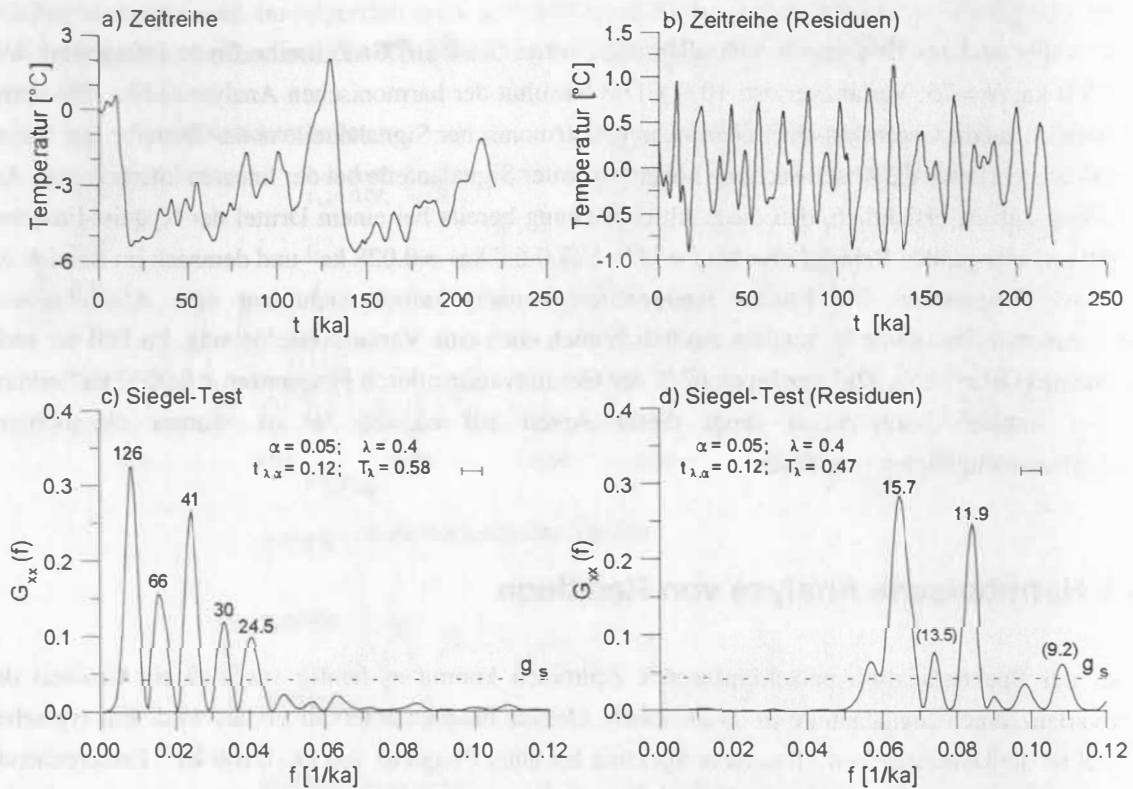


Abb. 33: a) Temperatur oberhalb der Inversionsschicht in der Ostantarktis basierend auf Messungen am Vostok-Eiskern (Jouzel et al., 1993). b) Residuen der Temperaturzeitreihe nach der Subtraktion aller harmonischen Komponenten mit Perioden größer als 20 ka. Die Residuen zeigen einen periodischen Verlauf und machen ca. 5 % der Gesamtvarianz der Daten aus. c) Harmonische Analyse der gesamten Zeitreihe (Testparameter: $\lambda = 0.4$; $\alpha = 0.05$; OFAC = 8). Die horizontale gestrichelte Linie markiert das kritische Niveau für den Test nach Siegel (g_s). Die Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an. d) Harmonische Analyse der Residuen. Periodendauern in Klammern markieren Periodogrammwerte, die sich aufgrund ihrer Amplitude nicht eindeutig auf harmonische Signalkomponenten zurückführen lassen. (Die harmonischen Analysen basieren auf trendbereinigten Zeitreihen.)

Yiou et al. (1991) haben entsprechende harmonische Signalanteile unter Verwendung der Thomson-Multitaper-Methode für den jüngeren Abschnitt des Vostok-Eiskerns beschrieben. Diese Autoren vermuten, daß diese Signalanteile durch Nichtlinearitäten des Klimasystems zustande kommen. Wird ein Eingangssignal, das beispielsweise aus drei sinusförmigen Schwingungen mit den Frequenzen f_1, f_2 und f_3 besteht, durch ein nicht lineares System übertragen, dann enthält das Ausgangssignal neben Komponenten mit den Frequenzen f_1, f_2 und f_3 noch weitere Signalanteile, deren Frequenzen sich aus einer linearen Kombination der Eingangsfrequenzen ergeben:

$$f_k = n_k f_1 + p_k f_2 + q_k f_3 ,$$

worin n_k, p_k und q_k beliebige ganze Zahlen sind. Dieser Vorgang wird als Intermodulation bezeichnet und die

entstehenden Frequenzen f_k als Intermodulationsfrequenzen (z.B. Schiffelbein und Dorman, 1986). Die Ordnung O_k einer Intermodulationsfrequenz ergibt sich aus der Summe der absoluten Beträge der Koeffizienten (z.B. Pestiaux et al., 1988):

$$O_k = |n_k| + |p_k| + |q_k|$$

und kann als ein Maß für den Grad der Nichtlinearität eines Übertragungssystems angesehen werden (z.B. Schiffelbein und Dorman, 1986). Yiou et al. (1991) führen die höherfrequenten Signalanteile, die sich in der Vostok-Temperaturzeitreihe nachweisen lassen, auf die Intermodulation der Milanković-Frequenzen ($1/41$, $1/23$ und $1/19$ ka^{-1}) zurück. Die harmonischen Komponenten der Residuen könnten durch folgende Kombinationen dieser Frequenzen erklärt werden:

$$\frac{1}{15.7} \approx \frac{1}{16.0} = -\frac{1}{41} + \frac{2}{23} \quad [\text{ka}^{-1}]$$

$$\frac{1}{11.9} \approx \frac{1}{11.6} = \frac{1}{41} - \frac{1}{23} + \frac{2}{19} \quad [\text{ka}^{-1}].$$

Diese Herangehensweise birgt allerdings die Möglichkeit der Fehlinterpretation: Abbildung 34 zeigt sämtliche Intermodulationsfrequenzen der o.g. Milanković-Frequenzen bis zur vierten Ordnung für Frequenzen bis ca. 0.21 ka^{-1} . In diesem Frequenzintervall existieren 61 Intermodulationsfrequenzen mit $2 \leq O_k \leq 4$, woraus ein mittlerer Abstand von $0.21 / 64 = 0.003 \text{ ka}^{-1}$ zwischen den Intermodulationsfrequenzen resultiert. Da die 6 dB-Bandbreite bei der Analyse typischer paläoklimatischer Zeitreihen in der Regel zwischen 0.005 und 0.01 ka^{-1} liegt, lassen sich die Intermodulationsfrequenzen in der Regel jedoch gar nicht auflösen. Das bedeutet, daß sich für eine beliebige harmonische Komponente praktisch immer eine Intermodulationsfrequenz finden läßt, die zur Erklärung der harmonischen Schwingung herangezogen werden kann! Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein harmonischer Signalanteil einer Intermodulationsfrequenz zugeordnet werden kann, steigt mit der maximalen Ordnung, die zur Bestimmung der Intermodulationsfrequenzen verwendet wird, da der mittlere Abstand zwischen den Intermodulationsfrequenzen bei steigender Ordnung sinkt.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

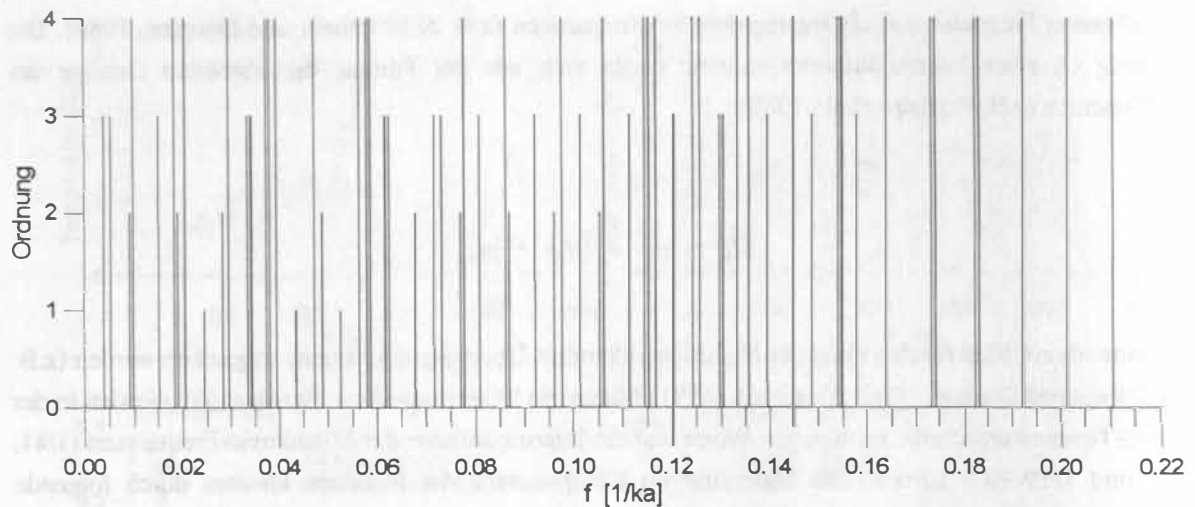


Abb. 34: Intermodulationsfrequenzen der Milanković-Perioden (41, 23 und 19 ka) bis zur vierten Ordnung und für Frequenzen bis ca. 0.21 ka^{-1} .

8.4 Kreuzspektralanalyse künstlich generierter Zeitreihen

8.4.1 Bivariater autoregressiver Prozeß erster Ordnung

Gegeben seien $N = 250$ äquidistante ($\Delta t = 1$) Realisationen des folgenden bivariaten autoregressiven Prozesses:

$$x_t = 0.6 x_{t-1} - 0.5 y_{t-1} + \epsilon_{xt},$$

$$y_t = 0.4 x_{t-1} + 0.4 y_{t-1} + \epsilon_{yt},$$

worin $\epsilon_x(t)$ und $\epsilon_y(t)$ zwei voneinander unabhängige, normalverteilte Zufallsprozesse, $\sim N(0,1)$ sind. Abbildung 35 zeigt sowohl die Autospektren, als auch Kohärenz- und Phasenspektren für eine unterschiedliche Anzahl von bei der Analyse verwendeten Segmenten. Um die Qualität der Schätzungen beurteilen zu können, wurden in Abbildung 35 zusätzlich die tatsächlichen Spektren (Jenkins und Watts, 1968, Kap. 8) dargestellt. In Bezug auf die Autospektren gilt auch hier das in Abschnitt 8.1.1 Gesagte. Es ist interessant zu beobachten, daß die Schätzung für $y(t)$ (Abb. 35f) relativ gut mit dem tatsächlichen Spektrum übereinstimmt und daß keine Anzeichen für eine zu starke Glättung erkennbar sind. Die gleiche Glättung, d.h. Anzahl der Segmente, führt bei der $x(t)$ -Zeitreihe allerdings bereits zu einer deutlichen Überschätzung des Spektrums für Frequenzen > 0.1 (Abb. 35e; Einheiten werden in diesem Beispiel nicht mitberücksichtigt). Obwohl die Varianz der Autospektralschätzungen für drei Segmente (Abb. 35a, b) relativ groß ist, wird der generelle Verlauf der tatsächlichen Autospektren korrekt wiedergegeben.

Wesentlich markantere Unterschiede in Abhängigkeit von der Glättung zeigen sich allerdings beim Vergleich der Kohärenzspektren (Abb. 35c, g). Während im Fall von zehn Segmenten das geschätzte

Kohärenzspektrum relativ gut mit dem theoretischen Verlauf übereinstimmt (eine Ausnahme stellt das Maximum bei $f=0.3$ dar), zeigen sich bei der geringen Glättung massive Unterschiede zwischen Schätzung und wahren Spektrum. Bei Frequenzen oberhalb von $f=0.2$ steigt die Varianz der Schätzung markant an, was sich im Auftreten sporadischer Maxima ('spurious peaks') bemerkbar macht. Diese Maxima werden teilweise durch die große Varianz der Kohärenzschätzung bei der Verwendung einer geringen Anzahl von Segmenten verursacht (die Varianz ist umgekehrt proportional zur Anzahl der Segmente; vergl. Gl. 42). Weiterhin spielt es eine Rolle, daß die Kohärenzschätzung bei der Verwendung von nur einem Segment unabhängig von der Frequenz einen Wert von Eins ergibt (s. Abschn. 5.2). Mit abnehmender Glättung nähert sich das geschätzte Kohärenzspektrum diesem Endglied kontinuierlich an, was sich in einer zunehmenden Zahl hoher Kohärenzwerte widerspiegelt. Bei Frequenzen < 0.2 tritt dieser Effekt nur deshalb nicht so deutlich in Erscheinung, da die tatsächliche Kohärenz hier relativ groß ist.

Die in Abbildung 35d und h gezeigten Phasenspektren geben bis zu einer Frequenz von ca. 0.3 die tatsächlichen Phasendifferenzen zwischen den Prozessen einigermaßen genau wieder. Die größere Varianz des Phasenspektrums in Abbildung 35d erklärt sich sowohl aus der geringen Glättung, als auch aus der hohen Varianz der geschätzten Kohärenz (vergl. Gl. 45). Die große Varianz des Phasenspektrums in Abbildung 35h für $f > 0.3$ kommt dadurch zustande, daß die Varianz unabhängig von der Glättung gegen unendlich wächst, wenn die Kohärenz gegen Null geht (vergl. Gl. 45). In beiden Fällen läßt sich eine systematische Unterschätzung des tatsächlichen Phasenwinkels im Frequenzbereich $f > 0.3$ beobachten, was vermutlich ebenfalls durch die geringe Kohärenz verursacht wird.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß es besonders bei geringer Glättung zum Auftreten sporadischer Maxima im Kohärenzspektrum kommen kann. Diese Maxima können bei der Analyse von Zeitreihen leicht als signifikante Kohärenzen fehlinterpretiert werden. Der Vergleich der tatsächlichen mit den geschätzten Phasenspektren verdeutlicht, daß es zu systematischen Fehlschätzungen kommen kann, die praktisch nicht erkennbar sind und ebenfalls zu Mißdeutungen der wahren Phasendifferenzen führen können.

8.4.2 Details zu Phasenspektren

Im vorherigen Beispiel wurde bereits deutlich, daß bei der Schätzung von Phasenwinkeln systematische Fehler auftreten können. Im folgenden sollen diese Fehler als Funktion der Anzahl der Segmente - und somit der Anzahl der Freiheitsgrade - und in Abhängigkeit vom **Signal-Rauschverhältnis** (S/N , 'signal-to-noise ratio' teilw. auch als SNR abgekürzt) untersucht werden. Darunter versteht man das Verhältnis zwischen der Varianz des eigentlichen Signals und der Varianz des Rauschens (z.B. Stearns und David, 1988, S. 193). Mit Gleichung 48 ergibt sich für ein sinusförmiges Signal:

$$\frac{S}{N} = \frac{\sigma_s^2}{\sigma_e^2} = \frac{A_s^2}{2 \sigma_e^2} \quad (49)$$

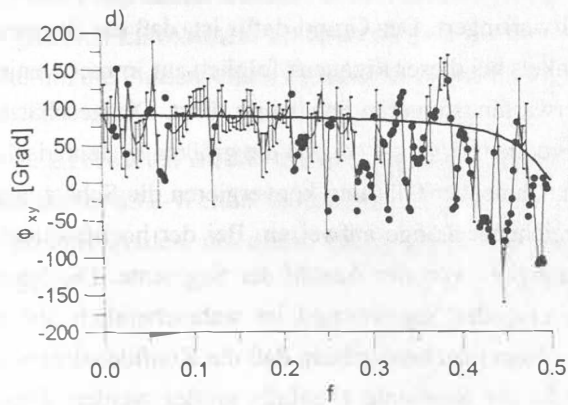
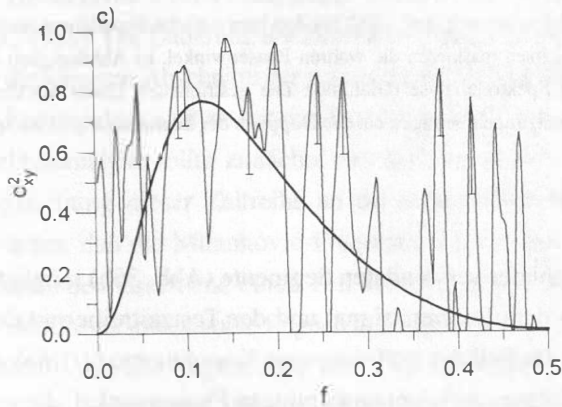
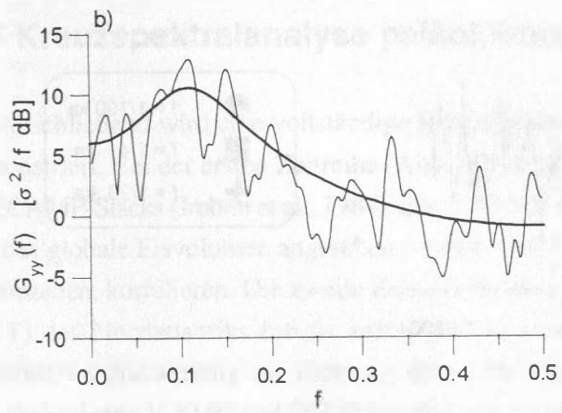
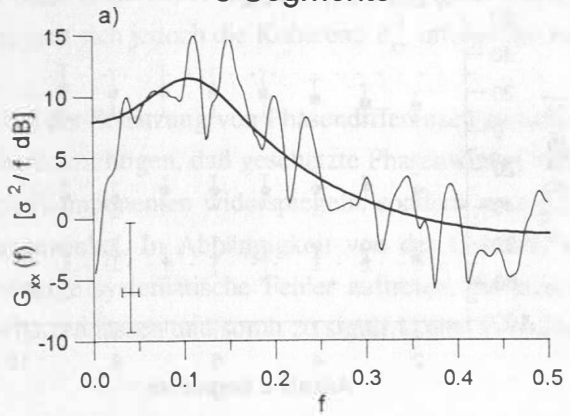
8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Abb. 35 (gegenüber): Kreuzspektralanalyse für einen bivariaten autoregressiven Prozeß (dünne Linien) für drei (a-d) bzw. zehn (e-h) überlappende Segmente. Aus der Segmentierung ergeben sich 6 bzw. 20 Freiheitsgrade. Dargestellt sind jeweils die Autospektren (a, b bzw. e, f), das Kohärenzspektrum (c bzw. g) und das Phasenspektrum (d bzw. h). Die dicken Linien zeigen den tatsächlichen Verlauf der jeweiligen Spektren an. Bei der Analyse wurden folgende Parameter gewählt: Blackman-Harris-Fenster; OFAC = 4; $\alpha = 0.1$. Die Fehlerkreuze in der linken, unteren Ecke der Autospektren (a, e) geben die 6 dB-Bandbreite (waagerechte Balken) für sämtliche Spektren bzw. das Konfidenzintervall für die Autospektren (vertikaler Balken) an. Bei den Kohärenzspektren (c und g) sind nur die negativen Konfidenzintervalle abgebildet. Um die Übersichtlichkeit zu verbessern, wurden Phasenfehler, die größer als $\pm 50^\circ$ sind, als Punkte in d) bzw. h) dargestellt. Aus dem gleichen Grund wurde in d) nur jeder zweite berechnete Punkt dargestellt. Weitere Erläuterungen im Text.

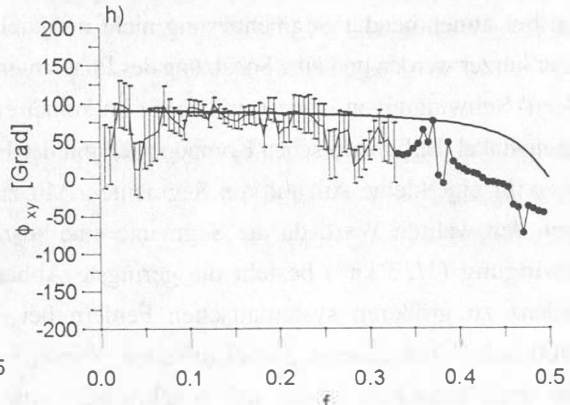
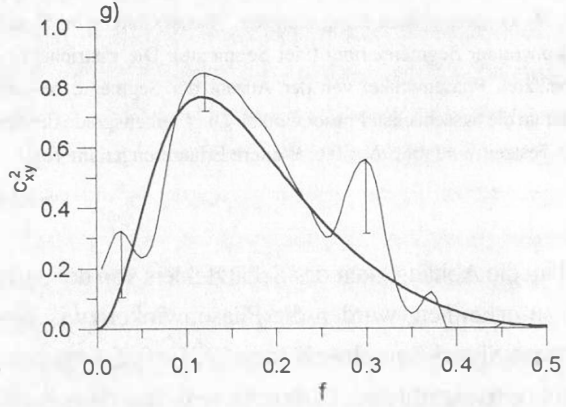
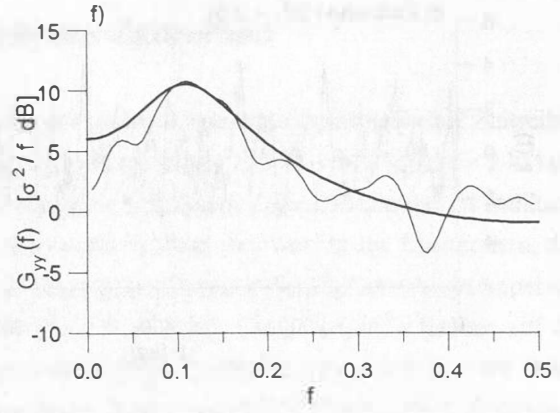
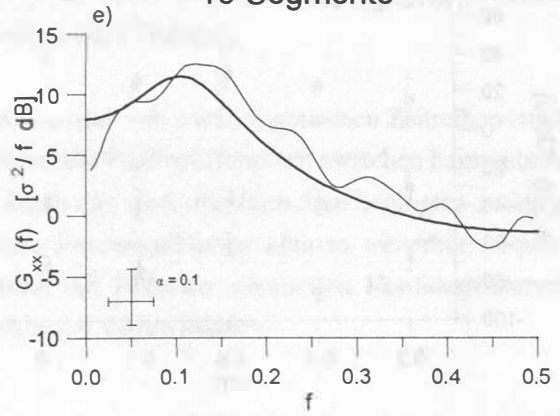
Als Referenzsignal $x(t)$ wurde ein rauschfreies harmonisches Signal nach Gleichung 47 mit folgenden Parametern generiert: $k = 3$; $A_{x1} = A_{x2} = A_{x3} = 1.0$; $f_{x1} = 1/100 \text{ ka}^{-1}$, $f_{x2} = 1/41 \text{ ka}^{-1}$, $f_{x3} = 1/23 \text{ ka}^{-1}$; $\psi_{x1} = \psi_{x2} = \psi_{x3} = 0$ und $\epsilon_x(t) = 0$. Weiterhin wurde $N = 266$ und $\Delta t = 3.0 \text{ ka}$ gewählt. Anschließend wurden mehrere verrauschte Testzeitreihen $y(t)$ erzeugt, deren Zeitachsen genau mit der des Referenzsignals übereinstimmen. Die Frequenzen und Amplituden der Sinusschwingungen stimmen ebenfalls genau mit denen des Referenzsignals überein. Unterschiede bestehen lediglich in den Phasenwinkeln ($\psi_{y1} = -40^\circ$, $\psi_{y2} = 30^\circ$ und $\psi_{y3} = -70^\circ$) und in der Varianz des Rauschens $\sigma_{\epsilon_y}^2$. Letztere wurde so gewählt, daß sich Signal-Rauschverhältnisse von 0.2, 0.4, ..., 1.0 für die drei harmonischen Signalanteile ergaben (Abbildung 36c zeigt eine dieser Zeitreihen für $S/N = 0.6$). Der zeitliche Verlauf von $\epsilon_y(t)$ ist für alle Testzeitreihen gleich, um zufällige Schwankungen der Resultate zu verhindern.

Zunächst wurde die Abhängigkeit der geschätzten Phasenwinkel vom Signal-Rauschverhältnis untersucht. Dazu wurden die Phasenwinkel bei den Frequenzen f_1 bis f_3 zwischen jeder Testzeitreihe und dem Referenzsignal ermittelt (Abb. 36a). Die Phasenspektren wurden dabei jeweils über vier Segmente gemittelt, woraus 8 Freiheitsgrade für die Schätzung resultierten. Dieses entspricht einer typischen Konfiguration bei der Analyse paläoklimatischer Zeitreihen, wodurch sich die Testergebnisse leichter auf solche Datensätze übertragen lassen. Im Fall der tiefen ($1/100 \text{ ka}^{-1}$) und mittleren ($1/41 \text{ ka}^{-1}$) Frequenz läßt sich eine systematische Abweichung zwischen dem tatsächlichen und dem geschätzten Phasenwinkel für kleine S/N beobachten. Mit zunehmendem S/N konvergieren die geschätzten Winkel gegen die wahren Phasendifferenzen, wobei dies umso besser geschieht, je tieffrequenter eine Schwingung ist. Die hochfrequente Signalkomponente ($1/23 \text{ ka}^{-1}$) zeigt dagegen kein eindeutiges konvergentes Verhalten für steigende S/N . Es ist weiterhin auffällig, daß die alleinige Berücksichtigung der Konfidenzintervalle, die ja lediglich zufällige Schwankungen beschreiben, zu einer signifikanten Unterschätzung der Differenz zwischen wahren und geschätztem Phasenwinkel führen kann.

3 Segmente



10 Segmente



8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

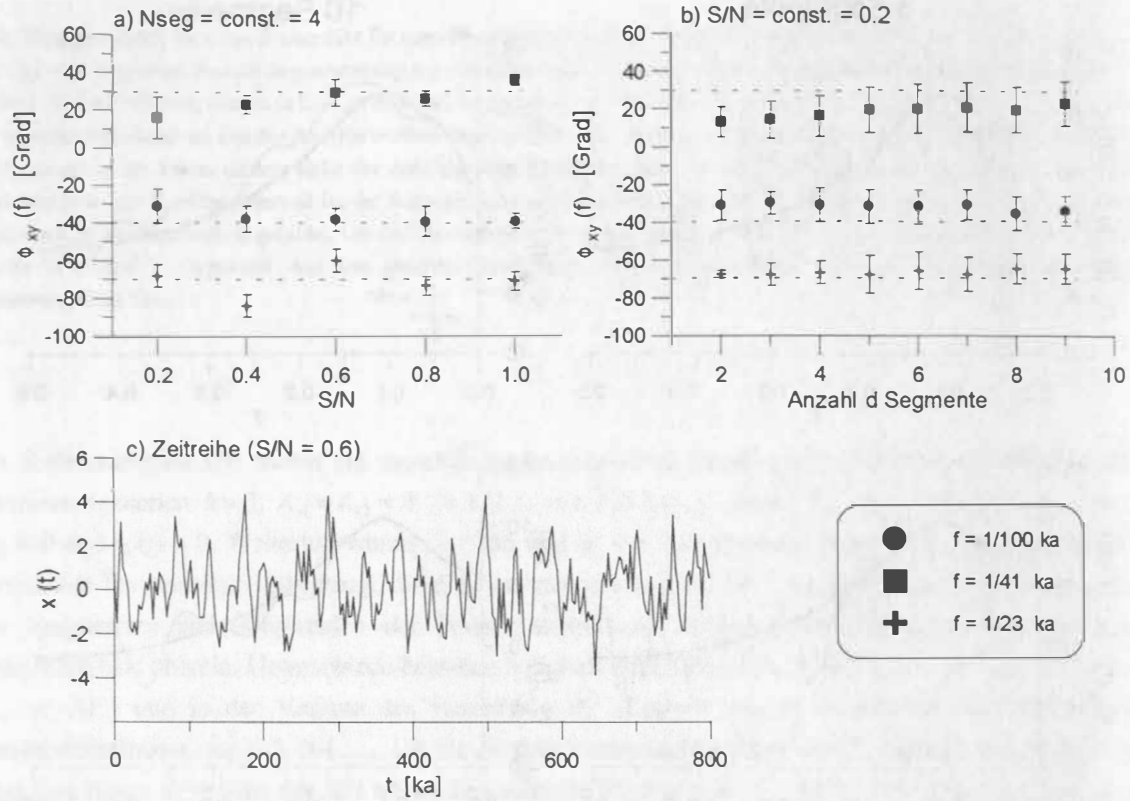


Abb. 36: a) Abhängigkeit der geschätzten Phasenwinkel vom Signal-Rauschverhältnis (S/N) für drei harmonische Signalkomponenten bei konstanter Segmentierung (vier Segmente). Die gestrichelten Linien markieren die wahren Phasenwinkel. b) Abhängigkeit der geschätzten Phasenwinkel von der Anzahl der Segmente bei der Spektralanalyse (Glättung). Die gestrichelten Linien markieren wiederum die tatsächlichen Phasenwinkel. Die Freiheitsgrade der Schätzungen betragen ca. das Doppelte der Segmentzahl. c) Beispiel einer Testzeitreihe für $S/N = 0.6$. Weitere Erläuterungen im Text.

Um die Abhängigkeit des Schätzfehlers von der Anzahl der verwendeten Segmente (Abb. 36b) möglichst gut zu erkennen, wurden die Phasenwinkel zwischen dem Referenzsignal und der Testzeitreihe mit dem kleinsten Signal-Rauschverhältnis ($S/N = 0.2$) ermittelt. Im Fall der tieffrequenten Komponente ($1/100 \text{ ka}^{-1}$) besteht eine signifikante Differenz zwischen dem geschätzten und dem tatsächlichen Phasenwinkel, die sich auch bei zunehmender Segmentierung nicht merklich verringert. Der Grund dafür ist, daß die Segmente immer kürzer werden und eine Schätzung des Phasenwinkels bei dieser Frequenz folglich auf immer weniger 'vollen' Schwingungen basiert und somit zu keiner erwartungstreueren Schätzung führt. Die geschätzten Phasenwinkel der harmonischen Komponenten mit der Frequenz $1/41 \text{ ka}^{-1}$ zeigen die größten systematischen Fehler für eine kleine Anzahl von Segmenten. Mit zunehmender Glättung konvergieren die Schätzungen gegen den wahren Wert, da die Segmente eine ausreichende Länge aufweisen. Bei der hochfrequenten Schwingung ($1/23 \text{ ka}^{-1}$) besteht die geringste Abhängigkeit von der Anzahl der Segmente. Die leichte Tendenz zu größeren systematischen Fehlern bei steigender Segmentzahl ist wahrscheinlich auf die einsetzende 'Überglättung' zurückzuführen. Weiterhin kann man beobachten, daß die Konfidenzintervalle beim hochfrequenten Signal mit zunehmender Anzahl der Segmente ebenfalls größer werden. Dieses

Verhalten erklärt sich aus Gleichung 45: Zwar wächst n_{eff} mit wachsender Zahl der Segmente, gleichzeitig verringert sich jedoch die Kohärenz \hat{c}_{xy}^2 infolge der zunehmenden Glättung.

Bei der Schätzung von Phasendifferenzen zwischen Signalen von paläoklimatischen Zeitreihen ist also zu berücksichtigen, daß geschätzte Phasenwinkel nicht nur die Phasendifferenzen zwischen harmonischen Signalkomponenten widerspiegeln, sondern auch die durch das inhärente Rauschen bedingten zufälligen Phasenwinkel. In Abhängigkeit von der Glättung eines Phasenspektrums können weiterhin frequenzabhängige systematische Fehler auftreten, die sich nicht mit Hilfe der ermittelten Konfidenzintervalle abschätzen lassen und somit zu signifikanten Fehlschätzungen führen können.

8.5 Kreuzspektralanalyse paläoklimatischer Zeitreihen

Abschließend wird eine vollständige Kreuzspektralanalyse anhand zweier paläoklimatischer Zeitreihen demonstriert. Bei der ersten Zeitreihe (Abb. 37a) handelt es sich um einen Teil ($T = 650$ ka, $\Delta t = 2$ ka) des SPECAMP-Stacks (Imbrie et al., 1984). Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte dieser äquidistanten Zeitreihe können als Indikator für das globale Eisvolumen angesehen werden, wobei die kleinsten Werte mit minimalen Eisvolumen, d.h. Warmzeiten, korrelieren. Die zweite Zeitreihe ist eine Schätzung der Sommeroberflächenwassertemperatur (SST) des Nordatlantiks für die letzten 647 ka ($\Delta t = 2$ ka; Abb. 37b). Diese Zeitreihe basiert auf der quantitativen Auswertung von Faunengemeinschaften planktischer Foraminiferen und wurde aus den Daten der Tiefseekerne V 30-97 und DSDP Site 607 zusammengesetzt (Ruddiman und McIntyre, 1981; Ruddiman et al., 1989). Die Datierung der Zeitreihe erfolgte mittels Sauerstoffisotopenstratigraphie. Es wurden jeweils nur die jüngeren Abschnitte der gesamten zur Verfügung stehenden Zeitreihen verwendet, um die Ergebnisse der Kreuzspektralanalyse mit den Resultaten von Imbrie et al. (1992) vergleichen zu können. Vor Beginn der Spektralanalyse sollte zunächst das Ziel der Analyse formuliert werden. Da der SPECAMP-Stack durch Angleichung dieser Zeitreihe an die solare Einstrahlung erfolgte ('tuning'; Imbrie et al., 1984), ist zu erwarten, daß die Milanković-Frequenzen ($1/41$ und $1/23$ ka⁻¹) sich als harmonische Signalkomponenten wiederfinden lassen und einen Teil der Gesamtvarianz erklären. Die Detektion der Milanković-Frequenzen im SPECAMP-Stack sollte folglich nicht das Ziel der Analyse sein. Obwohl die Datierung der SST-Zeitreihe ebenfalls auf der Angleichung der $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe der entsprechenden Kerne an die Einstrahlung erfolgte, kann eine Frage darauf abzielen, ob sich die harmonischen Signalkomponenten, die den Großteil der Varianz des globalen Eisvolumens erklären, auch in der SST-Zeitreihe finden lassen. Wenn dieses zutrifft, können weiterhin die Phasenbeziehungen entsprechender Signalkomponenten untersucht werden.

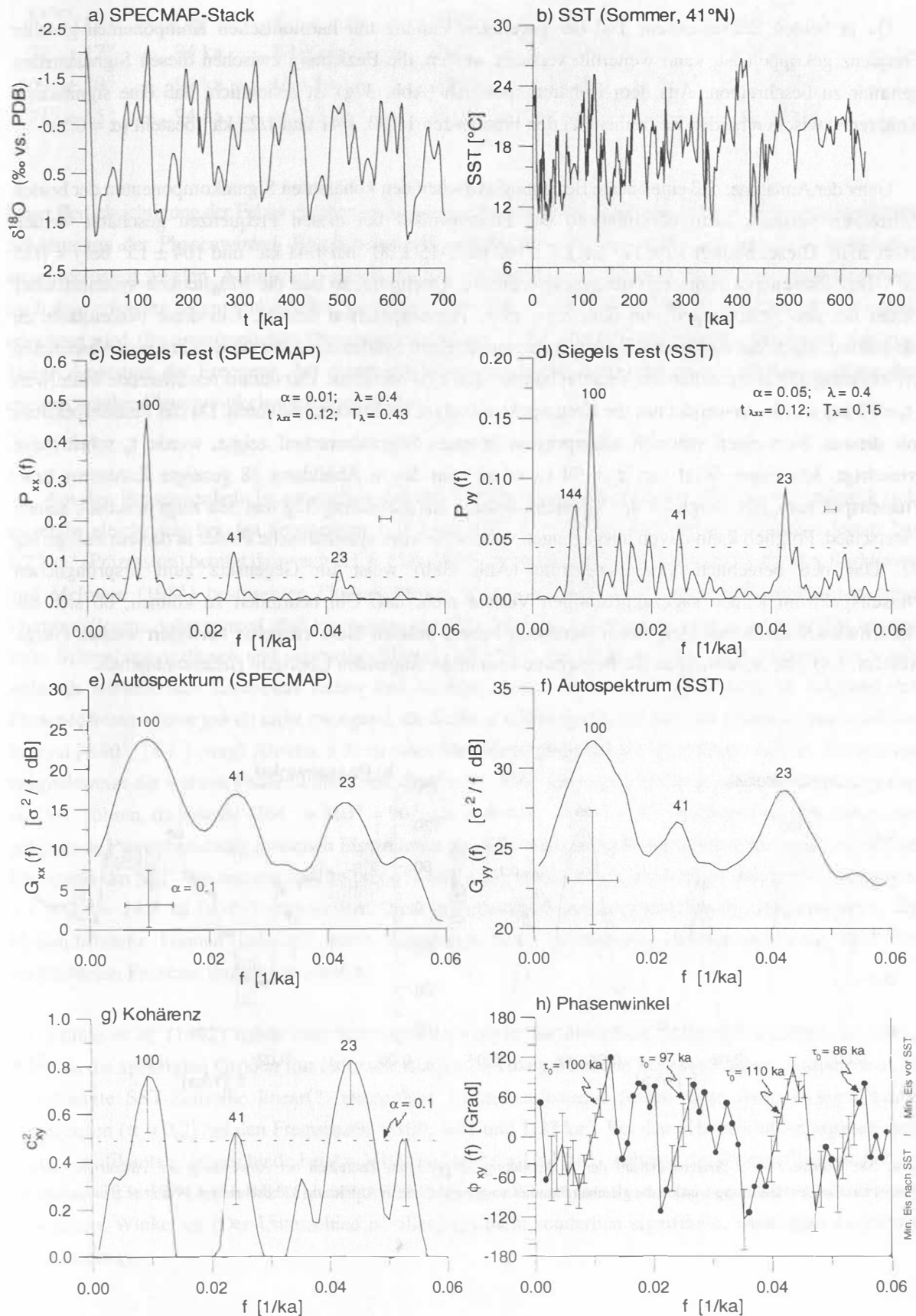
Da zu erwarten ist, daß die minimalen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des SPECAMP-Stacks, d.h. die Eisminima, mit den maximalen SST-Werten korrelieren, sollten die Vorzeichen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte vor der Spektralanalyse umgekehrt werden, um direkt interpretierbare Phasenbeziehungen zu erhalten (vergl. z.B. Imbrie et al., 1992).

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Abb. 37 (gegenüber): Kreuzspektralanalyse zwischen dem a) SPECMAP-Stack (Imbrie et al., 1984) und der b) geschätzten Oberflächenwassertemperatur (SST, warme Jahreszeit) im Nordatlantik (41°N, 33°W [V 30-97, DSDP Site 607]; Ruddiman et al. 1989). c) Harmonische Analyse des SPECMAP-Stacks mit Hilfe des Tests nach Siegel (OFAC = 4, HIFAC = 0.4, $\alpha = 0.01$; $\lambda = 0.4$). Die horizontale gestrichelte Linie markiert das kritische Niveau g_λ und der horizontale Balken die 6 dB-Bandbreite. Das Testergebnis ($T_\lambda > t_{\lambda,\alpha}$) zeigt das Vorhandensein harmonischer Signalkomponenten bei den Frequenzen 1/100, 1/41 und 1/23 ka^{-1} an (Zahlen oberhalb der Maxima geben die Periodendauer der entsprechenden Frequenzen in [ka] an). d) Harmonische Analyse nach Siegel für die SST-Zeitreihe (OFAC = 4, HIFAC = 0.4, $\alpha = 0.05$; $\lambda = 0.4$). Die Nullhypothese (weißes Rauschen) kann auch in diesem Fall verworfen werden, da $T_\lambda > t_{\lambda,\alpha}$ ist (harmonische Komponenten bei 1/100, 1/23 und evtl. 1/41 ka^{-1}). Das Maximum bei 1/144 ka^{-1} kann durch farbiges Rauschen hervorgerufen sein und wird daher nicht weiter berücksichtigt. e) und f) Autospektren der beiden Zeitreihen (Dreieckfenster; 5 Segmente; OFAC = 5; $\alpha = 0.1$). Die Fehlerkreuze in der linken unteren Ecke geben die 6 dB-Bandbreite (waagerechter Balken) bzw. die Konfidenzintervalle für die Schätzungen an. g) Kohärenzspektrum (Parameter und Bandbreite wie bei den Autospektren). Die horizontale Linie markiert das Niveau keiner signifikanten ($\alpha = 0.1$) Kohärenz. Kohärenzen sind nur dann signifikant, wenn sie sich oberhalb dieses Niveaus befinden. Demnach bestehen signifikante Kohärenzen bei den Frequenzen 1/100, 1/41 und 1/23 ka^{-1} . h) Phasenspektrum, wobei positive Werte das Vorseilen von Eisminima gegenüber SST-Maxima anzeigen (6 dB-Bandbreite wie in (e); Konfidenzintervalle für $\alpha = 0.1$; Phasenfehler $> \pm 50^\circ$ sind durch Punkte markiert). Bei $f = 1/23 = 0.044 \text{ ka}^{-1}$ beträgt der Phasenwinkel $104 \pm 15^\circ$, bei $f = 1/41 = 0.024 \text{ ka}^{-1}$ $-15 \pm 30^\circ$ und bei $f = 1/100 = 0.01 \text{ ka}^{-1}$ $10 \pm 17^\circ$ (das Vorzeichen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte wurde umgekehrt, um physikalisch sinnvolle Phasenwinkel zu erhalten). Die Werte an den linearen Segmenten des Phasenspektrums wurden zur ersten Abschätzung des 'Alignment'-Parameters verwendet. Vor allen Berechnungen wurde eine lineare Trendbereinigung durchgeführt.

Abbildung 37c zeigt das Ergebnis der harmonischen Analyse des SPECMAP-Stacks. Erwartungsgemäß treten die Milanković-Frequenzen (1/41 und 1/23 ka^{-1}) als signifikante harmonische Signalkomponenten auf. Ein Großteil der Varianz wird jedoch durch das Periodogrammaximum bei $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ erklärt. Ob diese harmonische Komponente durch die Veränderung der Exzentrizität der Erdbahn, einer internen Variabilität des Klimasystems oder einer Kombination beider Faktoren hervorgerufen wird, kann zur Zeit nicht abschließend beantwortet werden (z.B.: Saltzman, 1990; Imbrie et al., 1993) und soll hier unberücksichtigt bleiben. Die harmonische Analyse der SST-Zeitreihe deutet ebenfalls auf die Gegenwart harmonischer Frequenzen mit den Frequenzen 1/100 und 1/23 ka^{-1} hin. Die Gegenwart der 1/41 ka^{-1} -Komponente kann nicht eindeutig bestätigt werden, wenn man die Häufung lokaler Maxima im Frequenzintervall $[1/100 \text{ ka}^{-1} < f < 1/41 \text{ ka}^{-1}]$ berücksichtigt, das durch ein Maximum eines farbigen Hintergrundspektrums hervorgerufen sein könnte. Das Maximum bei $f = 1/144 \text{ ka}^{-1}$ sollte ebenfalls etwas vorsichtig interpretiert werden, da es durch eine farbige Rauschkomponente hervorgerufen sein könnte (vergl. Abb. 30g). Im Vergleich zur harmonischen Analyse des SPECMAP-Stacks fällt weiterhin auf, daß die harmonische Komponente bei 1/23 ka^{-1} die zweithöchste Periodogramamplitude hervorruft. Der SPECMAP-Stack und die SST-Zeitreihe weisen also harmonische Komponenten mit den gleichen Frequenzen (innerhalb der Auflösung) auf und zwar mit den Periodendauern 100, 23 und evtl. 41 ka. Die Autospektren der beiden Zeitreihen (Abb. 37e, f) werden im wesentlichen durch diese harmonischen Komponenten dominiert. Auffallend ist auch hierbei die kleinere Amplitude des Maximums bei 1/41 ka^{-1} im Vergleich zu dem Maximum bei 1/23 ka^{-1} der SST-Zeitreihe.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen



8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Da in beiden Zeitreihen ein Teil der jeweiligen Varianz mit harmonischen Komponenten gleicher Frequenz gekoppelt ist, kann weiterhin versucht werden, die Beziehung zwischen diesen Signalanteilen genauer zu beschreiben. Aus dem Kohärenzspektrum (Abb. 37g) ist ersichtlich, daß eine signifikante Kohärenz zwischen beiden Zeitreihen bei den Frequenzen $1/100$, $1/41$ und $1/23 \text{ ka}^{-1}$ besteht ($\alpha = 0.1$).

Unter der Annahme, daß eine lineare Beziehung zwischen den kohärenten Signalkomponenten der beiden Zeitreihen vorliegt, kann abschließend der Phasenwinkel bei diesen Frequenzen geschätzt werden (Abb. 37h). Dieser beträgt $10 \pm 17^\circ$ bei $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$, $-15 \pm 30^\circ$ bei $1/41 \text{ ka}^{-1}$ und $104 \pm 15^\circ$ bei $f = 1/23 \text{ ka}^{-1}$. Das Phasenspektrum zeigt ausgeprägte lineare Abschnitte, so daß die Möglichkeit systematischer Fehler bei den Schätzungen von Kohärenz- bzw. Phasenspektrum besteht. Um diese Fehlerquelle zu minimieren, wurde die 'Alignment'-Technik angewandt. Dazu wurden zunächst die den linearen Abschnitten in Abbildung 37h entsprechenden Verschiebungszeiten $\tau_0(i)$ bestimmt. Der daraus resultierende Mittelwert ($\tau_0 = 98 \text{ ka}$) wurde verwendet um die Kreuzspektralanalyse erneut durchzuführen. Da das Phasenspektrum mit diesem Wert einen schwach ausgeprägten inversen Sägezahnverlauf zeigte, wurde τ_0 schrittweise erniedrigt. Mit einem Wert von $\tau_0 = 94 \text{ ka}$ erhält man das in Abbildung 38 gezeigte Kohärenz- bzw. Phasenspektrum. Ein Vergleich der Kohärenzspektren aus Abbildung 37g und 38a zeigt praktisch keinen Unterschied. Folglich kann davon ausgegangen werden, daß der systematische Fehler in diesem Fall gering ist. Das neu berechnete Phasenspektrum (Abb. 38b) weist im Gegensatz zum ursprünglichen Phasenspektrum keinen sägezahnförmigen Verlauf mehr auf. Um beurteilen zu können, ob sich die Phasenwinkel durch das 'Alignment' verändert haben, müssen diese zunächst korrigiert werden (vergl. Abschn. 5.4). Die notwendigen Rechenschritte sind in der folgenden Übersicht zusammengefaßt:

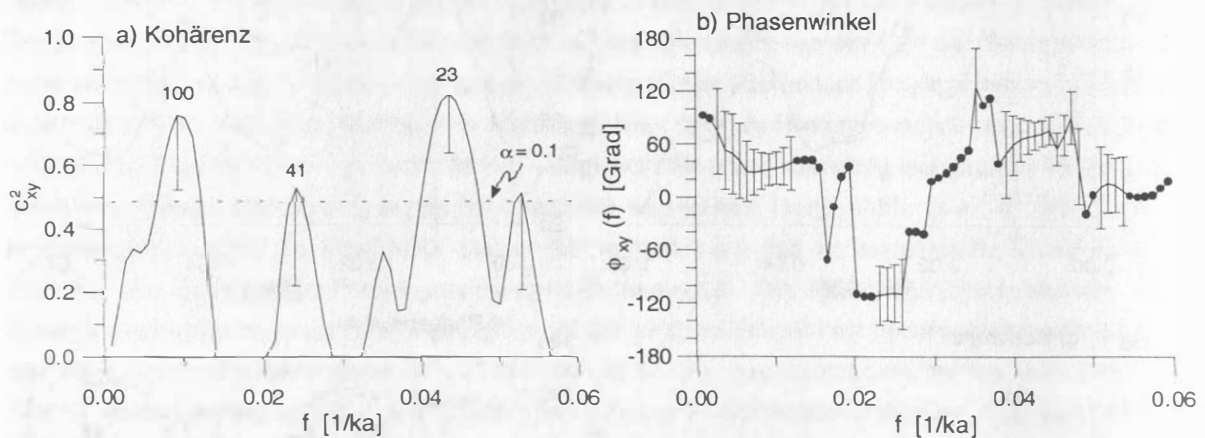


Abb. 38: Kohärenz- und Phasenspektrum der in Abbildung 37 gezeigten Zeitreihen bei Anwendung der 'Alignment'-Technik ($\tau_0 = 94 \text{ ka}$). Bei der Berechnung wurden die gleichen Parameter verwendet wie in Abbildung 37 beschrieben. Weitere Erläuterungen im Text.

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

$$\begin{array}{rclclclclcl}
 \hat{\phi}_{xy}^{\text{align}}(f) & + & t_{\text{align}} & \cdot & f & \cdot & 360^\circ & - & n \cdot 360^\circ & = & \hat{\phi}_{xy}(f) \\
 32^\circ \pm 17^\circ & + & 94 \text{ ka} & \cdot & 1/100 \text{ ka}^{-1} & \cdot & 360^\circ & - & 1 \cdot 360^\circ & \approx & 10^\circ \pm 17^\circ \\
 -109^\circ \pm 30^\circ & + & 94 \text{ ka} & \cdot & 1/41 \text{ ka}^{-1} & \cdot & 360^\circ & - & 2 \cdot 360^\circ & \approx & -3^\circ \pm 30^\circ \\
 71^\circ \pm 15^\circ & + & 94 \text{ ka} & \cdot & 1/23.1 \text{ ka}^{-1} & \cdot & 360^\circ & - & 4 \cdot 360^\circ & \approx & 96^\circ \pm 15^\circ
 \end{array}$$

Unter Berücksichtigung der Fehler ergeben sich also keine signifikanten Unterschiede zu den ursprünglichen Schätzungen der Phasenwinkel. Folglich können systematische Fehler auch in diesem Fall weitgehend ausgeschlossen werden. Allerdings verläuft das Phasenspektrum im Bereich der Milanković-Frequenzen nach dem erfolgten 'alignment' flacher, wodurch das Messen der Winkel bei diesen Frequenzen wesentlich erleichtert wird. (Im ursprünglichen Phasenspektrum [Abb. 37h] bewirken die linearen Abschnitte, daß eine kleine Änderung der Frequenz, bei denen ein Winkel bestimmt wird, eine relativ große Änderung des entsprechenden Phasenwinkels nach sich zieht.)

Aus den Phasenwinkeln ist erkennbar, daß das globale Eisvolumen und die SST im Nordatlantik sich ungefähr gleichzeitig bei den Frequenzen $1/100$ und $1/41 \text{ ka}^{-1}$ ändern. Die zeitliche Phasendifferenz bei $1/23 \text{ ka}^{-1}$ (Präzession) beträgt demnach $6.1 \pm 1 \text{ ka}$. Dieser Wert ist praktisch identisch zu der von Ruddiman und McIntyre (1981) bestimmten Phasendifferenz ($6.0 \pm 1.5 \text{ ka}$). Diese Autoren interpretieren diese Phasendifferenz dahingehend, daß Eisminima den SST-Maxima vorauslaufen. Als Ursache hierfür werden kalte Schmelzwasserlinsen und saisonales Meereis angeführt, wodurch das Oberflächenwasser im Nordatlantik während des Eisabbaus relativ kalt bleiben konnte. Diese Schlußfolgerung ist aufgrund der Phasendifferenz alleine jedoch nicht zwingend, da die Beschränkung des geschätzten Phasenwinkels auf das Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ (vergl. Abschn. 5.3) zu einer **Mehrdeutigkeit** bei der Interpretation führt. So würden beispielsweise die wahren Phasenwinkel von -264° bzw. 456° jeweils zu einem geschätzten Phasenwinkel von 96° führen, da sowohl $-264^\circ + 360^\circ = 96^\circ$, als auch $456^\circ - 360^\circ = 96^\circ$ ergeben. Folglich könnte die gefundene Phasenbeziehung zwischen Eisvolumen und SST auch in der Form interpretiert werden, daß die Eisminima den SST-Maxima um 18.9 ka (-264°) nacheilen, bzw., daß die Eisminima den SST-Maxima um $6.1 + 23 = 29.1 \text{ ka}$ (456°) vorauslaufen. Diese mehrdeutigen und gegensätzlichen Interpretationen der Phasendifferenz können lediglich durch Annahmen bzw. bestehendes Hintergrundwissen über die beobachteten Prozesse umgangen werden.

Imbrie et al. (1992) haben eine Kreuzspektralanalyse mit denselben Daten durchgeführt. Da diese Autoren die spektralen Größen mit Hilfe der Blackman-Tukey-Methode bestimmt haben, wurde die nicht äquidistante SST-Zeitreihe linear(?) interpoliert. Darauf aufbauend finden diese Autoren signifikante Kohärenzen ($\alpha = 0.2$) bei den Frequenzen $1/100$, $1/41$ und $1/23 \text{ ka}^{-1}$. Bei den Phasenwinkeln ergeben sich keine signifikanten Unterschiede bei $f = 1/100 \text{ ka}^{-1}$ und $f = 1/41 \text{ ka}^{-1}$, während die Phasendifferenz bei $f = 1/23 \text{ ka}^{-1}$ $72 \pm 12^\circ$ ($4.6 \pm 0.8 \text{ ka}$) beträgt (Fehler für $\alpha = 0.1$ umgerechnet) und somit kleiner als der hier geschätzte Winkel ist (Der Unterschied ist allerdings nicht sonderlich signifikant, wenn man die Fehler berücksichtigt).

8. Spektralanalyse anhand von Beispielen

Es soll an dieser Stelle nicht versucht werden, die Richtigkeit der einen oder anderen Schätzung zu postulieren. Unter Berücksichtigung des in Abschnitt 8.4.2 Gesagten sollten die Unterschiede vielmehr dahingehend verstanden werden, daß bei der Bestimmung von Phasenwinkeln größere Schätzfehler auftreten können, als aufgrund der Konfidenzintervalle vermutet wird. Dieses sollte bei geologischen Interpretationen, die teilweise auf relativ kleinen Phasendifferenzen basieren (z.B. Imbrie et al., 1992, 1993; Struck et al., 1993) berücksichtigt werden.

8.6 Notwendige Angaben zur Beurteilung von Analyseresultaten

Um die Ergebnisse von Spektralanalysen nachvollziehbar zu machen, sind die folgenden Angaben notwendig:

- Anzahl der unabhängig gemessenen Datenpunkte und das (durchschnittliche) Zeitintervall zwischen den Beobachtungen. Bei nicht äquidistanten Zeitreihen kann es ebenfalls sinnvoll sein, die Standardabweichung der Zeitintervalle anzugeben.
- Werden Zeitreihen interpoliert, dann sollte die Interpolationsmethode, der Varianzverlust und das Verhältnis zwischen der Anzahl originaler und interpolierter Punkte angegeben werden.
- Eine eventuelle Umkehrung von Vorzeichen im Zusammenhang mit Phasenspektren.
- Es sollte ebenfalls erkennbar sein, ob und wie eine Trendbereinigung durchgeführt wurde.
- Die Methode mit der eine Spektralanalyse durchgeführt wurde.
- Bei allen Spektren sollten die 6 dB-Bandbreite, die Konfidenzintervalle (inkl. Signifikanzniveau), der Faktor der Überbeprobung (OFAC) und die Anzahl der Segmente mitgeteilt werden. Bei Kohärenzspektren muß zusätzlich das kritische Niveau markiert sein, bei dem keine signifikante Kohärenz vorhanden ist.
- Bei der harmonischen Analyse ist das Testverfahren und die entsprechenden kritischen Werte bzw. Teststatistiken anzugeben.

9 Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

9.1 Allgemeines

In Abschnitt 6.3 wurde bereits erläutert, daß eine Möglichkeit der Nichtstationarität von Zeitreihen darin bestehen kann, daß sich die frequenzabhängige Varianzverteilung einer Zeitreihe entlang der Zeitachse verändert. Dieses kann beispielsweise dadurch verursacht werden, daß die Amplitudenverhältnisse zwischen harmonischen Signalkomponenten eine Funktion der Zeit sind. Gegeben sei der folgende harmonische Prozeß, bei dem die Amplitude der harmonischen Schwingung sich mit der Zeit ändert:

$$x(t) = A(t) \cos(2\pi f t - \psi) + \epsilon(t) .$$

Ziel der folgenden Betrachtungen ist es, die Funktion $A(t)$ - die auch als **Hüllkurve** bezeichnet wird - auf der Basis einer Zeitreihe zu schätzen. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Frequenz der harmonischen Schwingung bekannt ist. Da sich in $A(t)$ die zeitliche Entwicklung des betrachteten Prozesses widerspiegelt, spricht man auch von evolutionären oder zeitabhängigen Spektren (z.B. Priestley, 1989, Kap. 11). Die Theorie der evolutionären Spektralanalyse läßt sich auch auf Prozesse mit kontinuierlichen Spektren erweitern (z.B. Priestley, 1989, Kap. 11). Dieser Aspekt wird hier jedoch unberücksichtigt bleiben, da nur Prozesse mit harmonischen Signalanteilen untersucht werden sollen.

Bei der Spektralanalyse spätpleistozäner Zeitreihen im vorherigen Abschnitt wurde deutlich, daß ein Großteil der Datenvarianz mit harmonischen Signalkomponenten gekoppelt ist, deren Frequenz ca. $1/100 \text{ ka}^{-1}$ beträgt (vergl. Abb. 29 und 37). Es ist seit langem bekannt, daß die Spektren paläoklimatischer Indikatoren (besonder $\delta^{18}\text{O}$ als Indikator für das Eisvolumen) im Pliozän und frühen Pleistozän im Unterschied dazu durch harmonische Schwingungen mit einer Frequenz von $1/41 \text{ ka}^{-1}$ dominiert wurden (Shackleton und Opdyke, 1976; Pisias und Moore, 1981). Letztere Komponente kann relativ eindeutig auf die Veränderung der Schiefe der Erdbahn zurückgeführt werden (z.B. Imbrie et al., 1984). Die möglichen Ursachen der $1/100 \text{ ka}^{-1}$ -Komponente wurden bereits in Abschnitt 8.5 erwähnt. Der Übergang der dominanten Frequenz von $1/41$ zu $1/100 \text{ ka}^{-1}$ stellt einen fundamentalen Wechsel des Klimaregimes dar. Ein abrupter Übergang könnte als Wechsel zwischen *zwei* stabilen Zuständen des Klimasystems gewertet werden (Bifurkation), während ein kontinuierlicher Übergang eher eine Veränderung der Randbedingungen in *einem* stabilen Klimaregime andeuten würde (z.B. Park und Maasch, 1993 und Literatur darin).

Die genaue zeitliche Beschreibung des Übergangs von der Dominanz der 41 ka-Schwingungen zu der 100 ka-Periode kann folglich fundamentale Erkenntnisse über das zugrundeliegende Klimasystem liefern und wurde daher von einer Reihe von Autoren untersucht. Nach Pisias und Moore (1981) erfolgte der Übergang kontinuierlich im Zeitraum zwischen 900 und 1450 ka. Park und Maasch (1993) sind dieser Frage anhand mehrerer $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen nachgegangen, die die letzten ca. 2.6 Ma dokumentieren. Ihre Schätzungen der Hüllkurven legen den Schluß nahe, daß der Übergang eher kontinuierlich im Zeitraum zwischen 0.5 und 1 Ma stattfand. Zusätzlich fanden diese Autoren Hinweise auf 100 ka-Schwingungen - mit kleiner Amplitude - im Zeitraum zwischen 1.2 und 2.6 Ma. Weiterhin stellen Park und Maasch (1993) klar, daß das Schätzen von Hüllkurven stark von der Genauigkeit der Stratigraphie abhängt. Bolton et al. (1993) postulieren aufgrund von sog. 'Wavelet'-Analysen einen Übergang bei ca. 600 ka, der nicht kontinuierlich,

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

sondern in mehreren Schritten erfolgt sein soll. Neben Hüllkurven wurde in diesem Zusammenhang auch das Verhalten von Mittelwerten und Varianzen als Funktion der Zeit verschiedener $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen betrachtet. Maasch (1988) kommt aufgrund solcher Analysen zu dem Schluß, daß der Übergang abrupt war und vor ca. 900 ka erfolgte. Matteucci (1990) postuliert einen Übergang bei 600 ka, wobei aufgrund der Kürze des verwendeten Datensatzes nicht zu entscheiden war, ob der Wechsel abrupt erfolgte oder nicht. Es sollte beachtet werden, daß die Untersuchungen von Mittelwerten und Varianzen nicht notwendigerweise zu den gleichen Resultaten führen müssen wie eine Hüllkurvenanalyse (Mudelsee, 1995). Hier soll nun ein zusätzlicher Ansatz zur Schätzung von Hüllkurven nicht äquidistanter Zeitreihen beschrieben werden.

9.2 Schätzung von Hüllkurven

9.2.1 Prinzip

Die meisten Methoden zur Schätzung einer Hüllkurve basieren auf einer Segmentierung der Zeitreihe und der anschließenden Bestimmung der Hüllkurvenamplitude für jedes Segment (NB: diese Segmente haben nichts mit den Segmenten bei der WOSA-Methode zu tun). Im einfachsten Fall wird eine Zeitreihe in nicht überlappende Segmente unterteilt und anschließend die Autospektren aller Segmente bestimmt (z.B. Ruddiman et al., 1986; Raymo, 1992; Tiedemann et al., 1992). Trägt man die geschätzten Autospektren gegen eine Zeitachse auf (zeitliches Mittel des jeweiligen Segments), dann erhält man einen Eindruck vom Verlauf der Hüllkurve in Abhängigkeit von der Frequenz. Wenn die Hüllkurve abrupte Veränderungen der Amplitude aufweist, kann diese Art der Segmentierung aufgrund der schlechten zeitlichen Auflösung allerdings zu einer systematischen Fehlschätzung des wahren Hüllkurvenverlaufes führen (Abb. 39).

Um eine bessere zeitliche Auflösung zu erreichen, muß eine Zeitreihe in möglichst viele Segmente unterteilt werden. Das würde allerdings im Falle nicht überlappender Segmente bedeuten, daß die Schätzungen der Hüllkurve auf immer weniger Datenpunkten basiert und folglich immer unzuverlässigere Schätzungen resultiert (analog zur Diskussion des Unsicherheitsprinzips bei der Autospektralanalyse; s. Abschn. 3.2). Weiterhin ist zu beachten, daß tieffrequente Signalanteile, wie beispielsweise eine Schwingung, deren Periodendauer 100 ka beträgt, bei der Verwendung kurzer Segmente gar nicht einwandfrei erkannt werden können (s. Abschn. 8.1.3). Um eine höhere zeitliche Auflösung zu erzielen, ist es daher sinnvoll, eine Zeitreihe so zu segmentieren, daß sich die resultierenden Segmente (konstanter Länge) deutlich überlappen (Yiou et al., 1991). Birchfield und Ghil (1993) verwendeten zur Analyse plio-/pleistozäner $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen beispielsweise Segmente, deren zeitliche Länge 600 ka beträgt und die um 10 ka gegeneinander versetzt sind (Segment 1: 0-600 ka; Segment 2: 10-610ka; Segment 3: 20-620 ka usw.). Die Länge der Segmente gewährleistet sowohl das Erfassen tieffrequenter Signalanteile als auch das Erkennen abrupter Schwankungen der Hüllkurvenamplitude.

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

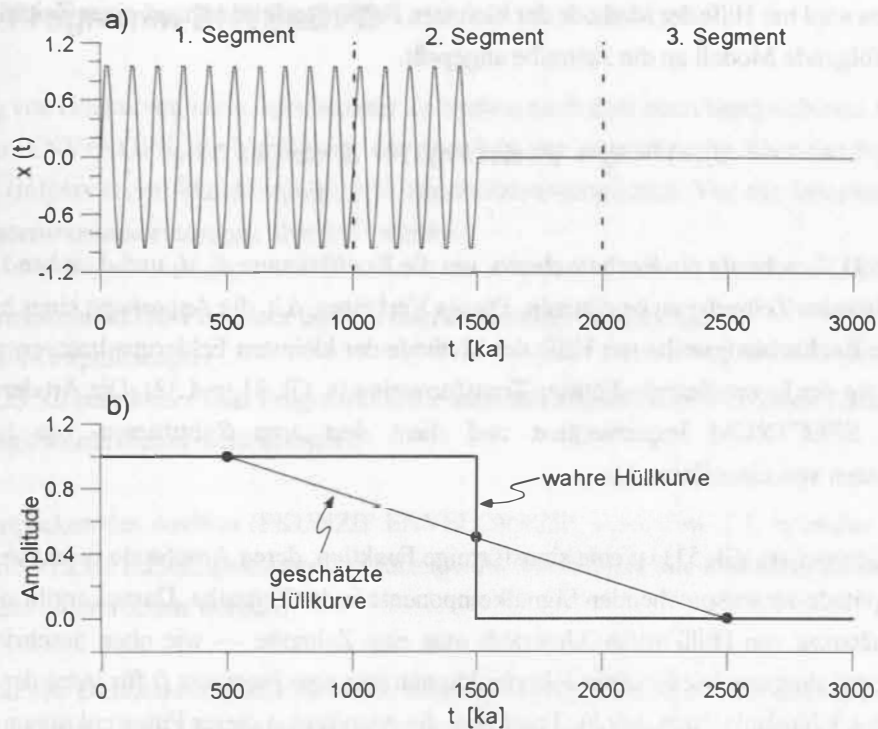


Abb. 39: Schätzung einer Hüllkurve bei einfacher Segmentierung. Die in a) dargestellte Sinusschwingung besitzt eine stufenförmige Hüllkurve. Zur deren Schätzung wird die Zeitreihe in drei Segmente unterteilt und die mittlere Amplitude für jedes Segment bestimmt (Punkte in [b]). Die Art der Segmentierung macht es unmöglich, den abrupten Amplitudenwechsel der Hüllkurve zu erkennen.

Neben den Unterschieden bei der Segmentierung bestehen weiterhin verschiedene Möglichkeiten, um die eigentliche Hüllkurvenamplitude für die jeweiligen Segmente zu bestimmen. Wie bereits erwähnt, werden dazu häufig die Autospektren der einzelnen Segmente geschätzt. Bei der Verwendung stark überlappender Segmente bedingt diese Methode jedoch sehr hohe Rechenzeiten. Ein Großteil dieser Zeit wird verwendet, um die Spektren in Frequenzbereichen zu ermitteln ($0 \leq f \leq f_{N/4}$), die gar nicht von Interesse bei der Analyse von Hüllkurvenamplituden bei einer bestimmten Frequenz sind.

Ferraz-Mello (1981) hat einen **Filteralgorithmus** beschrieben, der es erlaubt, harmonische Signalkomponenten einer vorgegebenen Frequenz von einer nicht äquidistanten Zeitreihe zu subtrahieren. Dieses Verfahren kann, in leicht modifizierter Form, auch zur effizienten Schätzung von Hüllkurvenamplituden verwendet werden. Gegeben sei eine Zeitreihe $x(t)$, die eine harmonische Signalkomponente mit der Frequenz f enthält. Gesucht ist eine Filterfunktion $d_f(t)$, die diese Signalkomponente innerhalb der Zeitreihe beschreibt. Die Subtraktion dieser Funktion von der Zeitreihe

$$x'(t) = x(t) - d_f(t) \quad (50)$$

führt dann zur gefilterten Zeitreihe $x'(t)$, die frei von harmonischen Signalkomponenten der Frequenz f ist.

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

Die Filterfunktion wird mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate anhand einer Zeitreihe geschätzt. Dazu wird das folgende Modell an die Zeitreihe angepaßt:

$$d_f(t) = d_0 + d_1 \sin(2\pi ft) + d_2 \cos(2\pi ft) . \quad (51)$$

Ferraz-Mello (1981) beschreibt ein Rechenschema, um die Koeffizienten d_0 , d_1 und d_2 anhand einer diskreten nicht äquidistanten Zeitreihe zu bestimmen. Dieses Verfahren, d.h. die Anpassung eines harmonischen Modells an eine Beobachtungsreihe mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate, entspricht genau dem Grundprinzip der Lomb-Scargle-Fourier-Transformation (s. Gl. 31 und 32). Die Art der Filterung ist im Programm SPECTRUM implementiert und dient dort zum Subtrahieren von harmonischen Signalkomponenten von einer Zeitreihe.

Die Filterfunktion $d_f(t)$ (Gl. 51) ist eine sinusförmige Funktion, deren Amplitude genau so groß ist, wie die *mittlere* Amplitude der entsprechenden Signalkomponente in der Zeitreihe. Daraus ergibt sich folgender Ansatz zur Schätzung von Hüllkurven: Unterteilt man eine Zeitreihe — wie oben beschrieben — in k Segmente und bestimmt anschließend die Filterfunktionen (für eine Frequenz f) für jedes der k Segmente, dann erhält man k Filterfunktionen $d_f(t,k)$. Trägt man die Amplituden dieser Filterfunktionen $A_d(k)$ gegen die mittlere Zeit des k -ten Segments auf, dann stellt diese Funktion eine Schätzung des Hüllkurvenverlaufes der harmonischen Signalkomponente mit der Frequenz f dar. Da die Amplituden $A_d(k)$ die gleiche physikalische Einheit wie die Daten der Zeitreihe besitzen, sind die Ergebnisse direkt interpretierbar.

Sollen die Hüllkurven von Signalkomponenten mit unterschiedlichen Frequenzen untersucht werden, stellt sich die Frage nach der optimalen **Länge der verwendeten Segmente**. Die minimale (zeitliche) Länge sollte ein Vielfaches der längsten Periodendauer, der untersuchten Signalanteile betragen. Sollen beispielsweise die Hüllkurven von Signalanteilen mit den Periodendauern 100, 41 und 23 ka untersucht werden, dann sollten die Segmente mindestens 150 bis 200 ka lang sein, um die tieffrequente Signalkomponente zu erfassen. Werden Segmente dieser Länge gewählt, dann ist es jedoch nicht mehr möglich, Details (z.B. abrupte Veränderungen) der Hüllkurve des 23 ka Signals zu erkennen, da jedes Segment 6.5 bis 8.6 volle Schwingungen dieses Signals enthält. Da die Schätzung der Hüllkurve nach Gleichung 51 nicht besonders rechenaufwendig ist, empfiehlt es sich, eine gegebene Zeitreihe für jede zu untersuchende Signalkomponente neu zu segmentieren. Dabei wird die zeitliche Länge der Segmente in Abhängigkeit von der Periodendauer der betrachteten Schwingung gewählt. Um eine maximale zeitliche Auflösung zu erhalten, können die Segmente um jeweils einen Datenpunkt gegeneinander versetzt sein. Bei Verwendung einer nicht äquidistanten Zeitreihe bedeutet dies, daß die Segmente (mit konstanter zeitlicher Länge) eine unterschiedliche Anzahl von Datenpunkten enthalten.

9.2.2 Das Programm ENVELOPE

Zur Schätzung von Hüllkurven nicht äquidistanter Zeitreihen nach dem oben beschriebenen Verfahren steht das Programm ENVELOPE zur Verfügung, das ebenfalls per anonymen ftp über das Internet bezogen werden kann ([infosrv.rz.uni-kiel.de; /pub/sfb313/mschulz/envelop3.zip](http://infosrv.rz.uni-kiel.de/pub/sfb313/mschulz/envelop3.zip)). Vor der Installation sollten die folgenden **Systemvoraussetzungen** überprüft werden:

- mindestens ein 80386-Prozessor und ein mathematischer Coprozessor
- ein VGA-Graphikadapter
- MS-DOS 5.0 oder höher (das Programm sollte auch mit älteren DOS-Versionen zusammenarbeiten, allerdings wurde dieses nicht getestet).

Nach dem Entpacken des Archivs (PKUNZIP ENVELOP3.ZIP, s. Abschn. 7.1) wird das Programm mit dem Befehl ENVELOPE.EXE gestartet. Die Anzeige des Titelschirmes kann durch Betätigung einer beliebigen Taste unterbrochen werden.

Der Aufbau von **Dateien** mit Zeitreihendaten entspricht genau dem von SPECTRUM (s. Abschn. 7.2). Der einzige Unterschied besteht darin, daß ENVELOPE 6000 Datenpunkte verarbeiten kann. Die Wahl einer Datendatei ist menügesteuert und wird wie in Abschnitt 7.3.1 beschrieben bedient. Nach dem Einlesen einer Datei muß die Frequenz eingegeben werden, für welche die Hüllkurve geschätzt werden soll. Die Frequenzeinheit ergibt sich dabei aus der Einheit der Zeitachse (z.B. **ENVFRQ** = 0.01 für $f = 0.01 \text{ ka}^{-1}$, wenn die Zeit in ka angegeben ist). Danach wird mit dem Parameter **WFAC** festgelegt, wieviele vollständige Schwingungen der Frequenz ENVFRQ jedes Segment enthalten soll. WFAC legt somit die Segmentlänge fest. Im obigen Beispiel würde mit $\text{WFAC} = 2$ in einer Segmentlänge von $T_{\text{seg}} = 2 / 0.01 \text{ ka}^{-1} = 200 \text{ ka}$ resultieren.

Anschließend erfolgt die graphische Darstellung Hüllkurvenamplitude als Funktion der Zeit. Die Einheit der Hüllkurvenamplitude ist identisch zur physikalischen Einheit der Eingangsdaten (z.B. ‰ für $\delta^{18}\text{O}$ -Daten). Am unteren Bildschirmrand wird die Hüllkurvenfrequenz, die Periodendauer und der Parameter WFAC angezeigt. Durch Drücken einer beliebigen Taste gelangt man zur zeitabhängigen Darstellung des Phasenwinkels der Filterfunktion $d_f(t)$ aus Gleichung 51. Für den Phasenwinkel eines Segmentes gilt: $\psi_{\text{seg}} = \tan^{-1}(d_1/d_2)$, worin d_1 und d_2 die Amplituden des Sinus- bzw. Cosinustermes in Gleichung 51 sind (s.a. Abschn. 2.1). Der Phasenwinkel gibt die zeitabhängige Phasenlage der harmonischen Schwingung mit der Frequenz ENVFRQ wieder, die mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an die Zeitreihe angepaßt wurde. Um Sprünge der Phasenfunktion, die durch die Beschränkung der Tangensfunktion auf das Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ entstehen können auszugleichen, wird eine Entzerrung durchgeführt: Sobald die Differenz zweier aufeinanderfolgender Phasenwinkel größer als 180° ist, werden 360° zu den folgenden Phasenwinkeln addiert (Stearns und David, 1988, S. 268). Durch Betätigung einer beliebigen Taste wird die Grafik verlassen. Anschließend können Zeitachse, Hüllkurvenamplitude und Phasenwinkel als ASCII-Datei gespeichert werden. Die sich anschließende Abfrage ermöglicht eine weitere Hüllkurvenschätzung für den geladenen Datensatz. Wird diese Abfrage mit 'n' beantwortet gelangt man zum '...again [y/n]' Prompt.

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

Durch Betätigung der 'y'-Taste kann eine neue Zeitreihendatei geladen werden. Die 'n'-Taste beendet das Programm.

Die Benutzung von ENVELOPE soll anhand eines Beispiels demonstriert werden. Gegeben sei eine nach Gleichung 47 generierte Zeitreihe mit den folgenden Parametern: $k = 3$; $A_1 = 1.0$ ($t \leq 1500$ ka) bzw. $A_1 = 0$ ($t > 1500$ ka), $A_2 = 0.6$, $A_3 = 0.3$; $f_1 = 1/100 \text{ ka}^{-1}$, $f_2 = 1/41 \text{ ka}^{-1}$, $f_3 = 1/23 \text{ ka}^{-1}$; $\psi_1 = \psi_2 = \psi_3 = 0$ und $\epsilon_t \sim N(0,1)$. Weiterhin wurde $N = 600$ und $\overline{\Delta t} = 5.0 \text{ ka}$ ($\text{Var}[\Delta t] = 1.0$) gewählt (Abb. 40a). Diese Zeitreihe befindet sich in der Datei ENVDEMO.DAT. Die Hüllkurve der harmonischen Komponenten mit der Frequenz $1/100 \text{ ka}^{-1}$ stellt eine Sprungfunktion dar, deren Verlauf in Abhängigkeit von der Segmentierung geschätzt werden soll. Die Zeitreihe wurde dazu nacheinander in Segmente der Längen 300, 500 und 700 ka unterteilt ($\text{ENVFRQ} = 0.01$; $\text{WFAC} = 3, 5$ und 7) und die Filterfunktion (Gl. 51) für alle Segmente bestimmt. Die Abbildungen 40b-d zeigen die geschätzten Hüllkurvenverläufe, wobei die geschätzten Amplituden jeweils gegen den Mittelwert der Zeit, die ein entsprechendes Segment bestreicht, aufgetragen worden sind. Daher kann die Hüllkurve nur im Zeitintervall $[T_{\text{seg}}/2 \leq t \leq T - T_{\text{seg}}/2]$ bestimmt werden, wobei T_{seg} die zeitliche Länge eines Segments und T die Gesamtlänge der Zeitreihe ist.

Es ist deutlich erkennbar, daß die Methode geeignet ist, um abrupte Amplitudenschwankungen der Hüllkurve zu detektieren auch dann, wenn noch andere Frequenzen im Signal vorhanden sind. Dieses geschieht umso besser, je kürzer die Segmente sind, die der Schätzung zugrunde liegen. Mit steigender Segmentlänge tritt ein Glättungseffekt auf, der dadurch zustande kommt, daß die geschätzten Amplituden eine Mittelung über die gesamte Segmentlänge darstellen. Die zunehmende Glättung verringert zwar den Einfluß der stochastischen Rauschkomponente, gleichzeitig aber wird die Stufenfunktion der Hüllkurve zunehmend flacher wiedergegeben. Die Übergangsdauer des Sprunges der Hüllkurvenamplitude bei 1500 ka wird systematisch um T_{seg} überschätzt (vergl. Mudelsee, 1995). Aus Abbildung 40 geht hervor, daß eine Segmentlänge zwischen 300 und 500 ka geeignet ist, um abrupte Schwankungen der Hüllkurve einer Signalkomponente mit der Frequenz $1/100 \text{ ka}^{-1}$ zu erkennen.

Weiterhin stellt sich die Frage nach der **Bandbreite der Filterfunktion**, d.h., wie weit darf die tatsächliche Frequenz einer harmonischen Signalkomponente von der Frequenz der Filterfunktion abweichen, um eine korrekte Schätzung der Hüllkurve zu erzielen? Umgekehrt läßt sich auch fragen, wie groß das Frequenzintervall ist, das die Schätzung der Hüllkurve bei einer Frequenz f beeinflußt. Die Bandbreite wurde empirisch anhand einer Zeitreihe ermittelt, die der in Abbildung 40a dargestellten Zeitreihe entspricht. Der einzige Unterschied besteht darin, daß die stochastische Komponente gleich Null gesetzt wurde. Für eine Segmentlänge von 300 ka wird die Hüllkurvenamplitude korrekt wiedergegeben, wenn die Frequenz der Filterfunktion um maximal $\pm 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ ka}^{-1}$ von der Frequenz der harmonischen Signalkomponente ($1/100 \text{ ka}^{-1}$) abweicht. Bei einer Abweichung von $\pm 2.5 \cdot 10^{-3} \text{ ka}^{-1}$ sinkt die geschätzte Amplitude auf die Hälfte der wahren Amplitude ab (3 dB-Bandbreite). Bei einer Erhöhung der Segmentlänge auf 500 ka stehen mehr Daten für die Schätzung der Filterfunktion zur Verfügung, woraus eine kleinere Bandbreite resultiert. Um die Amplitude der Hüllkurve korrekt zu schätzen, darf die Frequenz der Filterfunktion nur noch um $\pm 0.2 \cdot 10^{-3} \text{ ka}^{-1}$ von der Signalfrequenz abweichen. Eine Abweichung von $\pm 1.4 \cdot 10^{-3} \text{ ka}^{-1}$ bewirkt eine Halbierung der geschätzten Amplituden.

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

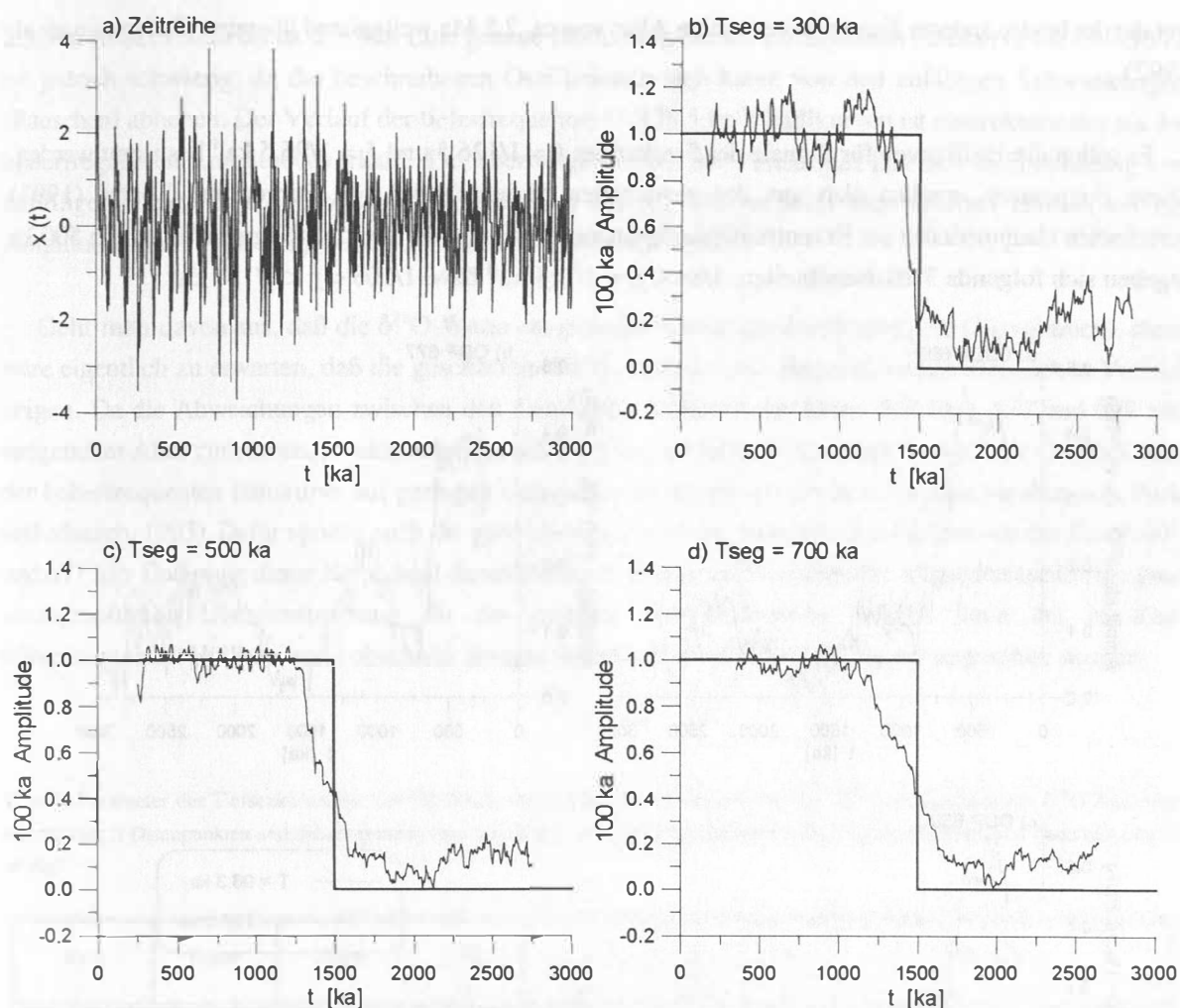


Abb. 40: a) Zeitreihe mit stufenförmiger Hüllkurve der 100 ka Signalkomponente (Parameter der Zeitreihe s. Text). b) Schätzung der Hüllkurve unter Verwendung einer Segmentlänge (T_{seg}) von 300 ka (WFAC = 3). c) Wie in b) jedoch für $T_{seg} = 500$ ka, WFAC = 5. d) Wie in b) jedoch für $T_{seg} = 700$ ka, WFAC = 7. Mit steigender Segmentlänge wird der abrupte Wechsel der Hüllkurvenamplitude aufgrund der Mittelung über längere Zeitabschnitte zunehmend schlechter geschätzt. Die Übergangsdauer wird systematisch um T_{seg} überschätzt (vergl. Mudelsee, 1995).

9.2.3 Plio-/Pleistozäne Entwicklung der 100 ka-Hüllkurve

Im folgenden wird das im vorherigen Abschnitt beschriebene Verfahren anhand von drei marinen $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen demonstriert (Tab. 6). Die an benthischen Foraminiferen gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte dokumentieren im wesentlichen die Variabilität des globalen Eisvolumens im Verlauf des Plio-/Pleistozäns. Die Zeitskalen der Daten von Site 607 und 677 basieren auf der von Shackleton et al. (1990) aufgestellten, astronomisch kalibrierten Chronostratigraphie. Die Datierung des Kerns von Site 659 erfolgte ebenfalls durch Anpassung an astronomische Parameter (Tiedemann, 1991; Tiedemann et al., 1992). Die Zeitskala dieses Kerns stimmt

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

mit der der beiden anderen Kernen bis zu einem Alter von ca. 2.5 Ma weitgehend überein (Tiedemann et. al, 1992).

Es sollen die Hüllkurven für Signale der Frequenzen $f_i = 1/126.5$ und $f_h = 1/96.5 \text{ ka}^{-1}$ bestimmt werden. Diese Frequenzen ergeben sich aus der gewichteten Mittelung der von Berger und Loutre (1991) berechneten Hauptperioden der Exzentrizitätskomponente der Erdbahn. Mit einer Segmentlänge von 500 ka ergeben sich folgende 3 dB-Bandbreiten: $1/84 < f_h < 1/111 \text{ ka}^{-1}$ bzw. $1/108 < f_i < 1/154 \text{ ka}^{-1}$.

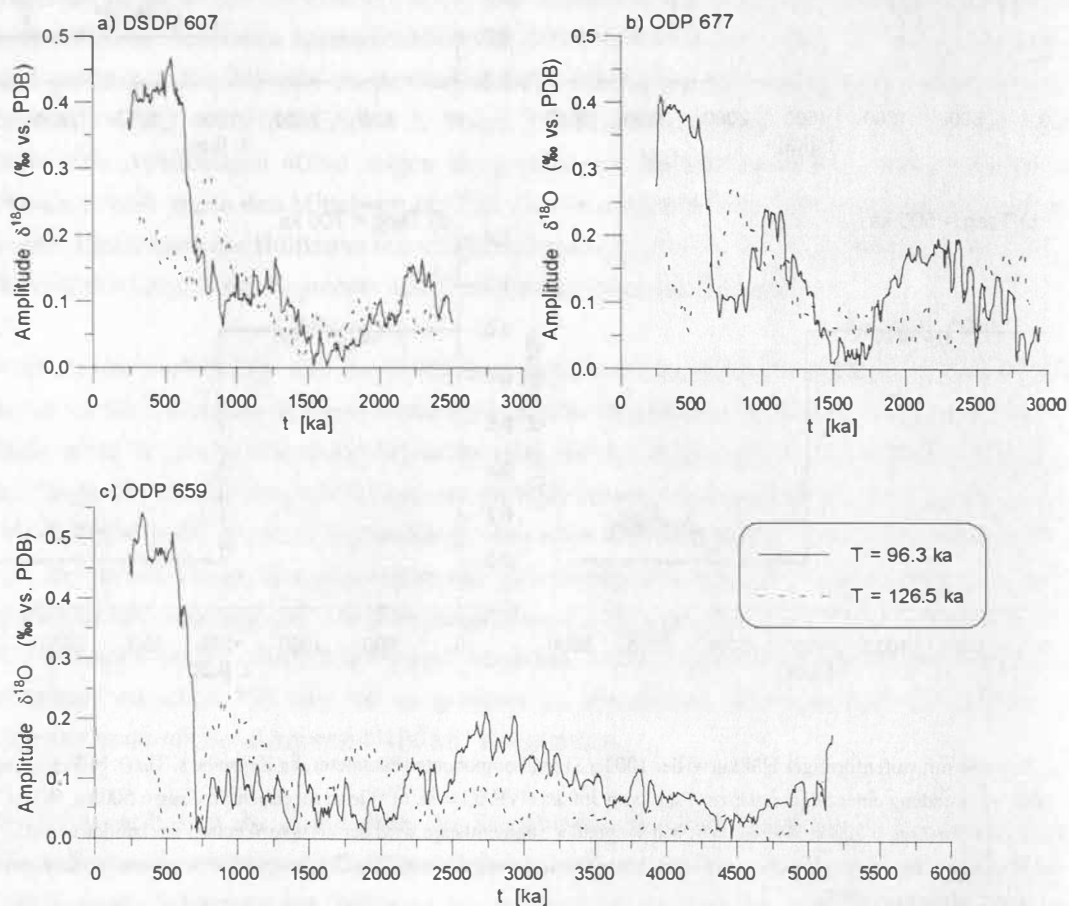


Abb. 41: Hüllkurvenentwicklung im Plio-/Pleistozän anhand von $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen verschiedener Tiefseekerne (Tab. 6) für die Frequenzen $1/96.3$ und $1/126.5 \text{ ka}^{-1}$ (die Länge der Segmente beträgt 500 ka). Auffälliges Merkmal aller höherfrequenten Hüllkurven ist der abrupte Anstieg der Amplitude vor ca. 650 ka. Weitere Erläuterungen im Text.

Auffälligstes Merkmal der geschätzten Hüllkurven (Abb. 41) ist ein markanter Anstieg der höherfrequenten ($1/96.3 \text{ ka}^{-1}$) Signalamplitude bei ca. 650 ka. Für $t > 650 \text{ ka}$ zeigen die Hüllkurven der höherfrequenten Komponente ein oszillierendes Verhalten, wobei allerdings nur sehr geringe Amplitudenschwankungen zu beobachten sind. Bei den Hüllkurven der Kerne 607 und 677 zeigen sich Maxima bei ca. 1.1 und 2.3 Ma; ein Amplitudenminimum existiert bei ca. 1.6 Ma. Die höherfrequente Komponente des Korns 659 zeigt bei 1.1 und 1.6 Ma dagegen nur ein undeutliches Maximum bzw. Minimum. Im Unterschied zu den Hüllkurven der beiden anderen Kernen besitzt diese Hüllkurve kein Amplitudenmaximum bei

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

2.3 Ma, sondern eines bei ca. 2.7 Ma. Eine genaue Bewertung der höherfrequenten Hüllkurve für $t > 650$ ka ist jedoch schwierig, da die beschriebenen Oszillationen sich kaum von den zufälligen Schwankungen (Rauschen) abheben. Der Verlauf der tieferfrequenten ($1/126.5 \text{ ka}^{-1}$) Hüllkurven ist unstrukturierter als die höherfrequenten Amplitudenverläufe. Der überwiegende Teil der Variationen läßt sich nicht eindeutig von zufälligen Fluktuationen unterscheiden. Lediglich bei ca. 770 ka zeigt sich in allen Hüllkurven ein Amplitudenmaximum, das jedoch keine steilen Flanken aufweist.

Geht man davon aus, daß die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte ein globales Klimasignal widerspiegeln (Eisvolumen), dann wäre eigentlich zu erwarten, daß die geschätzten Hüllkurven der drei Zeitreihen einen identischen Verlauf zeigen. Da die Abweichungen zwischen den Amplitudenverläufen der Kerne 607 bzw. 677 und 659 mit steigendem Alter zunehmen, ist anzunehmen, daß die Unterschiede im zeitlichen Verlauf der Oszillationen der höherfrequenten Hüllkurve auf geringen Unterschieden der verwendeten Zeitskalen beruhen (s.a. Park und Maasch, 1993). Dafür spricht auch die gute Übereinstimmung zwischen den Hüllkurven der Kerne 607 und 677 (der Datierung dieser Kerne liegt dieselbe Chronostratigraphie zugrunde). Da andererseits eine gute stratigraphische Übereinstimmung für die gesamte Brunhes-Epoche besteht, kann der in allen höherfrequenten Hüllkurven beobachtete abrupte Amplitudenanstieg als signifikant angesehen werden.

Tab. 6: Parameter der Tiefseekerne, die zur Schätzung von Hüllkurven verwendet wurden. Die nicht äquidistanten $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen bestehen aus N Datenpunkten und dokumentieren den Zeitraum T , wobei der durchschnittliche Abstand zwischen den Datenpunkten Δt beträgt.

Kern	Breite	Länge	Tiefe [m]	T [ka]	Δt [ka]	N	Referenz
V 30-97/ DSDP 607	41°00'N	32°58'W	3427	0-2758	3.6	757	Ruddiman et al., 1989 Raymo et al., 1992
ODP 659	18°05'N	21°02'W	3070	2-5486	4.6	1189	Tiedemann, 1991
ODP 677	01°12'N	83°44'W	3461	6-3190	2.8	1147	Shackleton & Hall, 1989 Shackleton et al., 1990

9. Evolutionäre Spektralanalyse nicht äquidistanter Zeitreihen

Die Evolutionäre Spektralanalyse (ESA) ist eine Methode zur Analyse von Zeitreihen, die nicht äquidistant sind. Sie basiert auf der Idee, dass die Frequenzkomponenten einer Zeitreihe sich über die Zeit hinweg ändern können. Die ESA ermöglicht es, diese Veränderungen zu identifizieren und zu quantifizieren. Dies ist besonders nützlich für die Analyse von Zeitreihen, die aus Beobachtungen zu unregelmäßigen Zeitpunkten bestehen, wie zum Beispiel in der Medizin oder in der Finanzwirtschaft.

Die ESA wird in zwei Hauptphasen unterteilt: die Identifizierung der Frequenzkomponenten und die Analyse ihrer zeitlichen Entwicklung. In der ersten Phase wird die Zeitreihe in ihre Frequenzkomponenten zerlegt. Dies geschieht durch die Anwendung von Fourier-Transformationen. In der zweiten Phase wird die zeitliche Entwicklung dieser Komponenten analysiert. Dies kann durch die Verwendung von Regressionsmodellen oder anderen statistischen Methoden erreicht werden. Die ESA ist eine flexible Methode, die an verschiedene Arten von Zeitreihen angepasst werden kann.

Die ESA ist eine wichtige Methode in der Zeitreihenanalyse, die es ermöglicht, die zeitliche Entwicklung von Frequenzkomponenten zu untersuchen. Sie ist besonders nützlich für die Analyse von Zeitreihen, die aus Beobachtungen zu unregelmäßigen Zeitpunkten bestehen.

Die ESA ist eine flexible Methode, die an verschiedene Arten von Zeitreihen angepasst werden kann. Sie ist besonders nützlich für die Analyse von Zeitreihen, die aus Beobachtungen zu unregelmäßigen Zeitpunkten bestehen.

Parameter	Wert	Einheit	Standardabweichung	Signifikanzniveau	Interpretation
α_1	0.12	1/s	0.05	0.05	Starke positive Korrelation
α_2	0.08	1/s	0.03	0.05	Mäßige positive Korrelation
α_3	0.05	1/s	0.02	0.05	Geringe positive Korrelation
α_4	0.03	1/s	0.01	0.05	Sehr geringe positive Korrelation

Die Ergebnisse der ESA zeigen, dass die Frequenzkomponenten der Zeitreihe über die Zeit hinweg stark positiv korreliert sind. Dies deutet auf eine starke zeitliche Entwicklung der Frequenzkomponenten hin. Die Standardabweichungen sind relativ gering, was auf eine hohe Stabilität der Ergebnisse hinweist.

Die ESA ist eine wichtige Methode in der Zeitreihenanalyse, die es ermöglicht, die zeitliche Entwicklung von Frequenzkomponenten zu untersuchen. Sie ist besonders nützlich für die Analyse von Zeitreihen, die aus Beobachtungen zu unregelmäßigen Zeitpunkten bestehen. Die Ergebnisse der ESA zeigen, dass die Frequenzkomponenten der Zeitreihe über die Zeit hinweg stark positiv korreliert sind. Dies deutet auf eine starke zeitliche Entwicklung der Frequenzkomponenten hin.

10 Schlußfolgerungen

10.1 Methodik

- Aus der Beschreibung der Methoden zur Spektralanalyse ist deutlich geworden, daß es sich hierbei um kein vollkommen objektives Schätzverfahren handelt, da die Wahl einiger Parameter (Fenstertyp, Anzahl der Segmente) von Erfahrungswerten abhängt. Spektralanalysen sollten daher nicht in der Form einer 'blackbox'-Methode angewendet werden, da eine Vielzahl inhärenter Fehlerquellen zu unsinnigen Ergebnissen führen können.
- Die Lomb-Scargle-Methode in Verbindung mit der 'Welch-Overlapped-Segment-Averaging'-Methode eignet sich sehr gut zur Spektralanalyse nicht äquidistanter paläoklimatischer Zeitreihen.
- Es sollten immer mehrere Spektralanalysen für einen Datensatz durchgeführt werden, mit unterschiedlichen Kombinationen der freien Parameter (Fenstertyp, Anzahl der Segmente). Das subjektive Herausfiltern konsistenter Eigenschaften eines Spektrums erlaubt dann Rückschlüsse auf Eigenschaften einer zugrundeliegenden spektralen Größe.
- Um die Ergebnisse einer Spektralanalyse nachvollziehbar zu machen, sollten neben der verwendeten Methode auch alle weiteren Parameter, die eine Spektralanalyse beeinflussen, angegeben werden.
- Werden interpolierte Datensätze verwendet, muß bei der statistischen Auswertung berücksichtigt werden, daß die interpolierten Punkte eventuell nicht statistisch unabhängig voneinander sind und somit zu einer Verfälschung statistischer Tests führen können.
- Von der Verwendung kubischer Splines in Verbindung mit Spektralanalysen ist dringend abzuraten, da diese zu signifikanten Veränderungen geschätzter spektraler Größen führen können.

10.2 Paläoklimatische Fragestellungen

- Paläoklimatische Interpretationen, die auf Spektralanalysen basieren, sind nicht nur von der Qualität der verwendeten Zeitreihen (z.B. Signal-Rauschverhältnis) abhängig, sondern auch von der Sorgfalt, mit der spektrale Größen *geschätzt* werden.
- Bevor bestimmte Phasenbeziehungen zwischen harmonischen Signalkomponenten (Milanković-Frequenzen) verschiedener Klimaindikatoren postuliert werden, muß mit Hilfe einer harmonischen Analyse geprüft werden, ob entsprechende Signalanteile überhaupt in den Ausgangszeitreihen vorhanden sind.
- Bei der Schätzung von Phasenspektren können systematische Fehler auftreten, die größer als die zufälligen Fehler (Konfidenzintervalle) sind. Dieser Umstand kann zu Fehlinterpretationen führen, wenn paläoklimatische Aussagen auf der Basis relativ kleiner (und scheinbar signifikanter) Phasenunterschiede gemacht werden.
- Die Mehrdeutigkeit geschätzter Phasenwinkel, die durch die Begrenzung auf das Intervall $[-180^\circ, 180^\circ]$ verursacht wird, muß bei geologischen Interpretationen berücksichtigt werden.
- Vermeintliche Maxima in einem Autospektrum bei einer Frequenz von ca. $1/404 \text{ ka}^{-1}$ (Exzentrizität) können leicht durch einen Trend in der Zeitreihe hervorgerufen werden.
- Werden harmonische Signalanteile in einer paläoklimatischen Zeitreihe auf *bestimmte* Intermodulationsfrequenzen zurückgeführt, ist zu berücksichtigen, daß letztere in Regel gar nicht auflösbar sind.
- Eine Spektralanalyse kann nie besser sein, als die Datierung einer paläoklimatischen Zeitreihe. Wenn die Datierung auf einer Anpassung an astronomische Parameter (Sauerstoffisotopenstratigraphie) basiert, darf das Vorhandensein signifikanter Signalkomponenten bei den Milanković-Frequenzen nur als Hinweis auf eine korrekte Datierung, nicht jedoch als Beweis für das tatsächliche Vorhandensein dieser Signale verstanden werden.

Literaturverzeichnis

- Akima, H. 1970: A new method of interpolation and smooth curve fitting based on local procedures. J. ACM, **17**, 589-602 (zitiert in Akima, 1991).
- Akima, H. 1991: A method of univariate interpolation that has the accuracy of a third order polynomial. ACM Trans. Math. Softw., **17**, 341-366.
- Bell, B. M., Percival, D. B. und Walden, A. T. 1993: Calculating Thomson's spectral multitapers by inverse iteration. J. Comp. Graph. Statist. (zitiert in Percival und Walden, 1993)
- Bendat, J. S. und Piersol, A. G. 1986: Random data, 2. Aufl. John Wiley and Sons, New York, 566 S.
- Benignus, V. A. 1969: Estimation of the coherence spectrum and its confidence interval using the Fast Fourier Transform. IEEE Trans. Audio, Electroacoustics, **AU-17**, 145-150 (Korrektur: AU-18, 320, 1970).
- Berger, A. und Loure, M. F. 1991: Insolation values for the climate of the last 10 million years. Quat. Sci. Rev., **10**, 297-317.
- Berger, A., Melice, J. L. und Hinnov, L. 1991: A strategy for frequency spectra of Quaternary climate records. Clim. Dyn., **5**, 227-240.
- Birchfield, G. E. und Ghil, M. 1993: Climate evolution in the Pliocene and Pleistocene from marine-sediment records and simulations: internal variability versus orbital forcing. J. Geophys. Res., **98D**, 10385-10399.
- Blackman, R. B. und Tukey, J. W. 1958: The measurement of power spectra. Dover Publications Inc., New York, 190 S.
- Bloomfield, P. 1976: Fourier analysis of time series: an introduction. John Wiley and Sons, New York, 258 S.
- Bolton, E. W., Maasch, K. A. und Lilly, J. M. 1993: A wavelet analysis of Plio-Pleistocene climate indicators: a new view of periodicity evolution. Eos, Trans., Amer. Geophys. Union, **74** (Suppl.), 366. (AGU Fall Meeting 1993; Zusammenfassung)
- Buttkus, B. 1991: Spektralanalyse und Filtertheorie in der angewandten Geophysik. Springer Verlag, Berlin, 650 S.
- Carter, G. C. 1977: Receiver operating characteristics for a linearly thresholded coherence estimation detector. IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing, **25**, 90-92.
- Carter, G. C., Knapp, C. H. und Nuttall, A. H. 1973: Estimation of the magnitude-squared coherence function via overlapped fast Fourier transform processing. IEEE Trans. Audio, Electroacoustics, **AU-21**, 337-344.
- Chatfield, C. 1984: The analysis of time series: an introduction, 3. Aufl. Chapman and Hall, London, 286 S.
- Clemens, S. C., Farrell, J. W. und Gromet, L. P. 1993: Synchronous changes in seawater strontium isotope composition and global climate. Nature, **363**, 607-610.
- Dalfes, H. N., Schneider, S. H. und Thompson, S. L. 1984: Effects of bioturbation on climatic spectra inferred from deep-sea cores. In: Berger, A. L., Imbrie, J., Hays, J. D., Kukla, G. und Saltzman, B. (Hrsg.), Milankovitch and climate, Part I. D. Reidel Publ. Company, Dordrecht, 481-492.
- Engelen-Müllges, G. und Reutter, F. 1991: Formelsammlung zur numerischen Mathematik mit PASCAL-Programmen, 3. Aufl. Bibliographisches Institut, Mannheim, 912 S.

Literaturverzeichnis

- Enochson, L. D. und Goodman, N. R. 1965: Gaussian approximations to the distribution of sample coherence, Technical Report AFFDL TR 65-67. Research and Tech. Div., AFSC, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio (zitiert in: Koopmans, 1974; Priestley, 1989).
- Ferraz-Mello, S. 1981: Estimation of periods from unequally spaced observations. *Astron. J.*, **86**, 619-624.
- Fisher, R. A. 1929: Tests of significance in harmonic analysis. *Proc. R. Soc. Lond., Ser. A*, **125**, 54-59 (zitiert in Percival und Walden, 1993).
- Fox, C. G. 1987: An inverse Fourier transform algorithm for generating random signals of a specified spectral form. *Comput. Geosciences*, **13**, 369-374.
- Fuhr, E. 1991: Koordinaten im Griff. *DOS International*, **5**, 380-381 (Dezember).
- Granger, C. W. J. und Hatanaka, M. 1964: Spectral analysis of economic time series. Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 299 S.
- Harris, F. J. 1978: On the use of windows for harmonic analysis with the discrete Fourier transform. *Proc. IEEE*, **66**, 51-83 (Nachdruck in Kesler, 1986).
- Hartung, J. 1993: Statistik, 9. Aufl. R. Oldenbourg Verlag, München, 975 S.
- Hays, J. D., Imbrie, J. und Shackleton, N. J. 1976: Variations in the Earth's orbit: pacemaker of the ice ages. *Science*, **194**, 1121-1132.
- Hess, D. E. 1991: Spectral analysis on a PC, Report No. NISTR 4733. U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 80 S.
- Horne, J. H. und Baliunas, S. L. 1986: A prescription for period analysis of unevenly sampled time series. *Astrophys. J.*, **302**, 757-763.
- Hovan, S. A., Rea, D. K. und Pisias, N. G. 1991: Late Pleistocene continental climate and oceanic variability recorded in northwest Pacific sediments. *Paleoceanogr.*, **6**, 349-370.
- Howard, W. R. und Prell, W. L. 1992: Late Quaternary surface circulation of the southern Indian Ocean and its relationship to orbital variations. *Paleoceanogr.*, **7**, 79-117.
- Imbrie, J., Hays, J. D., Martinson, D. G., McIntyre, A., Mix, A. C., Morley, J. J., Pisias, N. G., Prell, W. L. und Shackleton, N. J. 1984: The orbital theory of Pleistocene climate: Support from a revised chronology of the marine $\delta^{18}\text{O}$ record. In: Berger, A., Imbrie, J., Hays, J., Kukla, G. und Saltzman, B. (Hrsg.), *Milankovitch and climate*, Part I. D. Reidel Publ. Group, Dordrecht, 269-305.
- Imbrie, J., McIntyre, A. und Mix, A. 1989: Oceanic response to orbital forcing in the late Quaternary: observational and experimental strategies. In: Berger, A., Schneider, S. und Duplessy, J. C. (Hrsg.), *Climate and Geosciences. A challenge for science and society in the 21st century*. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 121-164.
- Imbrie, J., Boyle, E. A., Clemens, S. C., Duffy, A., Howard, W. R., Kukla, G., Kutzbach, J., Martinson, D. G., McIntyre, A., Mix, A. C., Molfino, B., Morley, J. J., Peterson, L. C., Pisias, N. G., Prell, W. L., Raymo, M. E., Shackleton, N. J. und Toggweiler, J. R. 1992: On the structure and origin of major glaciation cycles I. Linear response to Milankovitch forcing. *Paleoceanogr.*, **7**, 701-738.

- Imbrie, J., Berger, A., Boyle, E. A., Clemens, S. C., Duffy, A., Howard, W. R., Kukla, G., Kutzbach, J., Martinson, D. G., McIntyre, A., Mix, A. C., Molfino, B., Morley, J. J., Peterson, L. C., Pisias, N. G., Prell, W. L., Raymo, M. E., Shackleton, N. J. und Toggweiler, J. R. 1993: On the structure and origin of major glaciation cycles 2. The 100,000-year cycle. *Paleoceanogr.*, **8**, 699-735.
- Jenkins, G. M. und Watts, D. G. 1968: Spectral analysis and its application. Holden-Day, Oakland, 525 S.
- Jouzel, J., Barkov, N. I., Barnola, J. M., Bender, M., Chappellaz, J., Genthon, C., Kotlyakov, V. M., Lipenkov, V., Lorius, C., Petit, J. R., Raynaud, D., Raisbeck, G., Ritz, C., Stievenard, M., Yiou, F. und Yiou, P. 1993: Extending the Vostok ice-core record of paleoclimate to the penultimate glacial period. *Nature*, **364**, 407-412.
- Julian, P. R. 1975: Comments on the determination of significance levels of the coherence statistic. *J. Atmos. Sci.*, **32**, 836-837.
- Kay, S. M. und Marple, S. L., Jr. 1981: Spectrum analysis - a modern perspective. *Proc. IEEE*, **69**, 1380-1419 (Nachdruck in Kesler, 1986).
- Kesler, S. B. (Hrsg.) 1986: Modern spectrum analysis, II, Selected Reprint Series. IEEE Press, New York, 439 S.
- Komiz, M. A. und Pisias, N. G. 1979: Pleistocene climate: deterministic or stochastic? *Science*, **204**, 171-173.
- Koopmans, L. H. 1974: The spectral analysis of time series. Academic Press, New York, 366 S.
- Kortemeyer, G., Laschek, M. und Glasser, W. 1993: Programmierung von Coprozessoren ab 80387 mit Turbo Pascal und C++. IWT Verlag, Vaterstätt b. München, 391 S.
- Lechner, W. und Lohl, N. 1990: Analyse digitaler Signale. Friedr. Vieweg und Sohn, Braunschweig, 261 S.
- Lees, J. M. und Park, J. 1995: Multiple-taper spectral analysis: a stand-alone C-subroutine. *Comput. Geosciences*, **21**, 199-236.
- Liebetrau, A. 1989: Turbo Pascal 5.0/5.5 Units und Utilities. Friedr. Vieweg und Sohn, Braunschweig, 382 S.
- Lii, K.-S. und Tsou, T. H. 1992: Detecting sinusoids in non-Gaussian noise. *J. Time Ser. Anal.*, **13**, 391-409.
- Lomb, N. R. 1976: Least-squares frequency analysis of unequally spaced data. *Astrophys. Space Sci.*, **39**, 447-462.
- Lüke, H. D. 1992: Signalübertragung, 5. Aufl. Springer Verlag, Berlin, 301 S.
- Maasch, K. A. 1988: Statistical detection of the mid-Pleistocene transition. *Clim. Dyn.*, **2**, 133-143.
- Matteucci, G. 1990: Analysis of the probability distribution of the late Pleistocene climatic record: implications for model validation. *Clim. Dyn.*, **5**, 35-52.
- Mix, A. C., Pisias, N. G., Zahn, R., Rugh, W., Lopez, C. und Nelson, K. 1991: Carbon 13 in Pacific deep and intermediate waters, 0-370 ka: implications for ocean circulation and Pleistocene CO₂. *Paleoceanogr.*, **6**, 205-226.
- Mudelsee, M. 1995: Entwicklung neuer statistischer Analysemethoden für Zeitreihen mariner, stabiler Isotopen: die Evolution des globalen Plio-/Pleistozänen Klimas. Diss. Universität Kiel, 153 S.
- Nuttall, A. H. 1981: Some windows with very good sidelobe behaviour. *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, **29**, 84-91.

Literaturverzeichnis

- Park, J. und Maasch, K. A. 1993: Plio-Pleistocene time evolution of the 100-kyr cycle in marine paleoclimate records. *J. Geophys. Res.*, **98B**, 447-461.
- Percival, D. B. und Walden, A. T. 1993: Spectral analysis for physical applications. Cambridge University Press, Cambridge, 583 S.
- Pestiaux, P. und Berger, A. 1984: Impacts of deep-sea processes on paleoclimatic spectra. **In:** Berger, A. L., Imbrie, J., Hays, J., Kukla, G. und Saltzman, B. (Hrsg.), *Milankovitch and climate, Part I*. D. Reidel Publ. Company, 493-510.
- Pestiaux, P., van der Mersch, I., Berger, A. und Duplessy, J. C. 1988: Paleoclimatic variability at frequencies ranging from 1 cycle per 10000 years to 1 cycle per 1000 years: evidence for nonlinear behaviour of the climate system. *Clim. Change.*, **12**, 9-37.
- Pisias, N. G. und Moore, T. C., Jr. 1981: The evolution of Pleistocene climate: A time series approach. *Earth Planet. Sci. Lett.*, **52**, 450-458.
- Pisias, N. G., Mix, A. C. und Zahn, R. 1990: Nonlinear response in the global climate system: Evidence from benthonic oxygen isotope record in core RC13-110. *Paleoceanogr.*, **5**, 147-160.
- Press, W. H. und Rybicki, G. B. 1989: Fast algorithm for spectral analysis of unevenly sampled data. *Astrophys. J.*, **338**, 277-280.
- Press, W. H. und Teukolsky, S. A. 1988: Search algorithm for weak periodic signals in unevenly spaced data. *Computers in Physics*, **2**, 77-82.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. und Vetterling, W. T. 1989: Numerical recipes in Pascal. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 759 S.
- Priestley, M. B. 1989: Spectral analysis and time series. London, Academic Press, 937 S.
- Raymo, M. E. 1992: Global climate change: a three million year perspective. **In:** Kukla, G. J. und Went, E. (Hrsg.), *Start of a Glacial*, NATO ASI Series., Bd. I 3. Springer Verlag, Berlin, 207-223.
- Raymo, M. E., Ruddiman, W. F., Backman, J., Clement, B. M. und Martinson, D. G. 1989: Late Pliocene variation in northern Hemisphere ice sheets and North Atlantic deep water circulation. *Paleoceanogr.*, **4**, 413-446.
- Raymo, M. E., Hodell, D. und Jansen, E. 1992: Response of deep-ocean circulation to initiation of northern Hemisphere glaciation (3-2 Ma). *Paleoceanogr.*, **7**, 645-672.
- Rubenking, N. J. 1991: Turbo Pascal 6.0 techniques and utilities. Ziff-Davis Press, Emeryville, 892 S.
- Ruddiman, W. F. und McIntyre, A. 1981: Oceanic mechanisms for amplification of the 23,000-year ice-volume cycle. *Science*, **212**, 617-627.
- Ruddiman, W. F., Raymo, M. und McIntyre, A. 1986: Matuyama 41,000-year cycles: North Atlantic Ocean and northern Hemisphere ice-sheets. *Earth Planet. Sci. Lett.*, **80**, 117-129.
- Rümelin, W. 1990: Simulation of fractional Brownian motion. **In:** Peitgen, H., Henriques, J. M. und Penedo, L. F. (Hrsg.), *Fractal 90, Proceedings of the 1st IFIP conference on fractals*, Lisbon, June 6-8, 1990. Elsevier (Vorabdruck).
- Sachs, L. 1992: Angewandte Statistik. Springer Verlag, Berlin, 846 S.

- Saltzman, B. 1990: Three basic problems in paleoclimatic modeling: a personal perspective and review. *Clim. Dyn.*, **5**, 67-78.
- Scannell, E. H., Jr. und Carter, G. C. 1978: Confidence bounds for magnitude-squared coherence estimates. *IEEE Int. Conf. Acoustics, Speech and Signal Processing*. (April 10-12, 1978, Tulsa, Oklahoma)
- Scargle, J. D. 1982: Studies in astronomical time series analysis. II. Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data. *Astrophys. J.*, **263**, 835-853.
- Scargle, J. D. 1989: Studies in astronomical times series analysis. III. Fourier transforms, autocorrelation functions, and cross-correlation functions of unevenly spaced data. *Astrophys. J.*, **343**, 874-887.
- Schiffelbein, P. und Dorman, L. 1986: Spectral effects of time-depth nonlinearities in deep-sea sediment records: a demodulation technique for realigning time and depth scales. *J. Geophys. Res.*, **91B**, 3821-3835.
- Schüller, U. und Veddeler, H.-G. 1992: PC aufrüsten und reparieren. Data Becker Verlag, Düsseldorf, 657 S.
- Schulz, M., Mudelsee, M. und Wolf-Welling, T. C. W. 1994: Fractal analyses of Pleistocene marine oxygen isotope records. In: Kruhl, J. H. (Hrsg.), *Fractals and dynamic systems in geosciences*. Springer Verlag, Berlin, 307-317.
- Schuster, A. 1898: On the investigation of hidden periodicities with application to a supposed 26 day period of meteorological phenomena. *Terrestrial Magnetism*, **3**, 13-41 (zitiert in Percival und Walden, 1993).
- Schwarzacher, W. 1975: Sedimentation models and quantitative stratigraphy, *Developments in Sedimentology*, Bd. 19. Elsevier, Amsterdam, 382 S.
- Schwarzacher, W. 1993: Cyclostratigraphy and the Milankovitch theory, *Developments in Sedimentology*, Bd. 52. Elsevier, Amsterdam, 225 S.
- Shackleton, N. J. und Opdyke, N. D. 1976: Oxygen isotope and paleomagnetic stratigraphy of Pacific core V28-239. late Pliocene to latest Pleistocene. In: Cline, R. M. und Hays, J. D. (Hrsg.), *Investigation of late Quaternary paleoceanography and paleoclimatology*, *Geol. Soc. Amer. Mem.*, Bd. 145., Boulder, 449-464.
- Siegel, A. F. 1979: The noncentral chi-squared distribution with zero degrees of freedom and testing for uniformity. *Biometrika*, **66**, 381-386 (zitiert in Percival und Walden, 1993).
- Siegel, A. F. 1980: Testing for periodicity in a time series. *J. Am. Statist. Ass.*, **75**, 345-348.
- Stearns, S. D. und David, R. A. 1988: *Signal processing algorithms*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 349 S.
- Stoyan, D. 1993: *Stochastik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Akademie Verlag, Berlin, 307 S.
- Struck, U., Sarnthein, M., Westerhausen, L., Barnola, J. M. und Raynaud, D. 1993: Ocean-atmosphere carbon exchange: impact of the "biological pump" in the Atlantic equatorial upwelling belt over the last 330,000 years. *Palaeogeogr., Palaeoclimatol., Palaeoecol.*, **103**, 41-56.
- Thomson, D. J. 1982: Spectrum estimation and harmonic analysis. *Proc. IEEE*, **70**, 1055-1096.
- Tiedemann, R. 1991: Acht Millionen Jahre Klimageschichte von Nordwest Afrika und Paläo-Ozeanographie des angrenzenden Atlantiks: Hochauflösende Zeitreihen von ODP-Sites 658-661. *Ber. Geol.-Paläont. Inst. Univ. Kiel*, **46**, 1-190.

Literaturverzeichnis

- Tiedemann, R., Mudelsee, M., Sarnthein, M. und Stattegger, K. 1992: Astronomic tuning of high-resolution benthic $\delta^{18}\text{O}$ records from ODP Sites 658 and 659 for the last 5 million years vs. non-linear climatic dynamics. *Geomar Rep.*, **15**, 282. (Fourth International Conference on Paleoceanography, 21-25 Sept. 1992, Kiel, Zusammenfassung).
- Tukey, J. W. 1980: Can we predict where 'time series' should go next? **In:** Brillinger, D. B. und Tiao, G. C. (Hrsg.). *Directions in time series analysis*. Institute of Mathematical Statistics, Hayward, 1-31 (zitiert in Percival und Walden, 1993).
- Verado, D. J. und McIntyre, A. 1994: Production and destruction: control of biogenous sedimentation in the tropical Atlantic 0-300,000 years B.P. *Paleoceanogr.*, **9**, 63-86.
- Vogelsang, E. 1990: Paläo-Ozeanographie des Europäischen Nordmeeres an Hand stabiler Kohlenstoff- und Sauerstoffisotope. *Ber. Sonderforschungsbereich 313, Univ. Kiel*, **23**, 1-136.
- Welch, P. D. 1967: The use of fast Fourier transform for the estimation of power spectra: A method based on time averaging over short, modified periodograms. *IEEE Trans. Audio, Electroacoustics*, **AU-15**, 70-73.
- Yiou, P., Genthon, C., Ghil, M., Jouzel, J., Le Treut, H., Barnola, J. M., Lorius, C. und Korotkevitch, Y. N. 1991: High-frequency paleovariability in climate and CO_2 levels from Vostok ice-core records. *J. Geophys. Res.*, **96B**, 20365-20378.

Anhang

• Dateiformate (Ausgabe) von SPECTRUM

UNIVARIATE SPEKTRALANALYSE:

Autospektrum:

Endung der Datei: **.PX**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-14: selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

15 : frei

16 : Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Gxx : Autospektralwerte (lineare Skala)

- δ [Gxx] : negatives Konfidenzintervall von Gxx

+ δ [Gxx] : positives Konfidenzintervall von Gxx

Gxx [dB]: Autospektralwerte (Dezibel Skala)

Period : Periodendauer = 1 / Frequenz

ab 17 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1: Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Gxx : Autospektralwerte (lineare Skala)

-Delta : negatives Konfidenzintervall von Gxx

Gxx [dB]: Autospektralwerte (Dezibel Skala)

ab 2: Ergebnisse der Analyse

BIVARIATE SPEKTRALANALYSE:

Autospektren:

Neben der bei der univariaten Analyse erzeugten Datei (.PX) wird noch eine zweite Datei mit dem gleichen Aufbau gespeichert, die das Autospektrum der zweiten Zeitreihe enthält (.PY).

Kreuzspektrum:

Endung der Datei: **.PXY**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-14: selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

15 : frei

16 : Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Gxy : Kreuzspektralwerte (lineare Skala)

Gxx [dB]: Kreuzspektralwerte (Dezibel Skala)

Period : Periodendauer = 1 / Frequenz

ab 17 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1 : Titel der Datenspalten mit
 Freq. : Frequenz
 Gxx : Autospektralwerte (lineare Skala)
 Gxx [dB]: Autospektralwerte (Dezibel Skala)
 ab 2 : Ergebnisse der Analyse

Kohärenzspektrum:

Endung der Datei: **.CXY**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-14: selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

15 : frei
 16 : Titel der Datenspalten mit
 Freq. : Frequenz
 Cxy² : Kohärenzwerte
 -δ[Cxy²] : negatives Konfidenzintervall (-9.999 → nicht bestimmt für Cxy² < False-Alarm-Wert)
 +δ[Cxy²] : positives Konfidenzintervall (-9.999 → nicht bestimmt für Cxy² < False-Alarm-Wert)
 False Alarm : Niveau der nicht signifikanten Kohärenz
 Period : Periodendauer = 1 / Frequenz
 ab 17 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1: Titel der Datenspalten mit
 Freq. : Frequenz
 Cxy**2 : Kohärenzwerte
 -Delta : negatives Konfidenzintervall (" " → nicht bestimmt für Cxy² < False-Alarm-Wert)
 False Alarm : Niveau der nicht signifikanten Kohärenz
 ab 2 : Ergebnisse der Analyse

Phasenspektrum:

Endung der Datei: **.PHI**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-14: selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

15 : frei
 16 : Titel der Datenspalten mit
 Freq. : Frequenz
 Phi : Phasenwinkel
 ±δ[Phi] : Konfidenzintervall
 Period : Periodendauer = 1 / Frequenz
 17 : Information über Vorzeichen des Phasenwinkels
 ab 18 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1: Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Phi : Phasenwinkel

Delta : Konfidenzintervall (" " wenn $\Delta > \pm 50^\circ$ ist)

> Maxphi : Markiert Phi an Stellen wo $\Delta > \pm 50^\circ$ ist

ab 2: Ergebnisse der Analyse

HARMONISCHE ANALYSEFisher/Siegel-Test:

Endung der Datei: **.HFS**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-11: selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

12 : frei

13 : Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Pxx : normalisiertes Periodogramm

gf : kritischer Wert für Fishers Test

gs : kritischer Wert für Siegels Test

Period : Periodendauer = $1 / \text{Frequenz}$

ab 14 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1 : Titel der Datenspalten identisch zur Daten-Datei

ab 2 : Ergebnisse der Analyse

Scargles-Test:

Endung der Datei: **.HSC**

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1-8 : selbsterklärender Kopf mit Analyseparametern in Klartext

9 : frei

10 : Titel der Datenspalten mit

Freq. : Frequenz

Pxx : normalisiertes Periodogramm

False Alarm : kritischer Wert für Scargles Test

Period : Periodendauer = $1 / \text{Frequenz}$

ab 11 : Ergebnisse der Analyse

Aufbau einer Plotdatei:

Zeile 1: Titel der Datenspalten identisch zur Daten-Datei

ab 2: Ergebnisse der Analyse

• Dateiformat (Ausgabe) von ENVELOPE

Aufbau einer Datendatei:

Zeile 1: Titel der Datenspalten mit
Time : zeitliches Mittel des gleitenden Fensters
Envelope : geschätzte Hüllkurvenamplitude
Phase : geschätzte Hüllkurvenphase
StdDev : Standardabweichung der Daten innerhalb des gleitenden Fensters
Variance : Varianz der Daten innerhalb des gleitenden Fensters
ab 2 : Ergebnisse der Analyse

Danksagung

Prof. Dr. Karl Stattegger danke ich herzlich für die Betreuung, der diesem Bericht zugrunde liegenden Diplomarbeit.

Besonders danken möchte ich Dr. Manfred Mudelsee, der mich auf einigen 'geophantastischen' Ausflügen mit ernüchternden physikalischen und mathematischen Fakten konfrontierte.

Mein weiterer Dank gilt Dr. J. Scargle (Ames Research Center, Moffet Field, CA), der mir einige Punkte seiner Methode näher erläutert hat und Dr. W. Rümelin (Systemtechnik Nord, Bremen), der mir freundlicherweise ein Programm zur fraktalen Interpolation zur Verfügung gestellt hat.

Dr. M. Raymo (MIT, Cambridge, MA), Dr. R. Tiedemann und Dr. J. Jouzel (Laboratoire de Modélisation du Climat et de l'Environnement, Gif-sur-Yvette) danke ich für die freundliche Überlassung von Isotopendaten verschiedener ODP-Sites bzw. der Vostok-Temperaturdaten.

Jayne Welling-Wolf und Babette Krämer haben mir mit der schnellen und gründlichen Stilblüten-beseitigung sehr geholfen — vielen Dank.